

(12) NACH DEM VERTRAG ÜBER DIE INTERNATIONALE ZUSAMMENARBEIT AUF DEM GEBIET DES  
PATENTWESENS (PCT) VERÖFFENTLICHTE INTERNATIONALE ANMELDUNG

(19) Weltorganisation für geistiges Eigentum  
Internationales Büro



(43) Internationales Veröffentlichungsdatum  
28. März 2002 (28.03.2002)

PCT

(10) Internationale Veröffentlichungsnummer  
**WO 02/25205 A1**

(51) Internationale Patentklassifikation<sup>7</sup>: **G01B 7/24**,  
C09B 47/04, 47/08, 47/26, C01G 51/00

28, 40468 Düsseldorf (DE). **KOSTROMINE, Serguei**  
[RU/DE]; Katharinenstr. 28, 53913 Swisstal (DE). **OSER,**  
**Rafael** [DE/DE]; Buschstr. 171, 47800 Krefeld (DE).

(21) Internationales Aktenzeichen: PCT/EP01/10427

(74) Gemeinsamer Vertreter: **BAYER AKTIENGE-**  
**SELLSCHAFT**; 51368 Leverkusen (DE).

(22) Internationales Anmeldedatum:  
10. September 2001 (10.09.2001)

(25) Einreichungssprache: Deutsch

(26) Veröffentlichungssprache: Deutsch

(30) Angaben zur Priorität:  
100 46 771.1 21. September 2000 (21.09.2000) DE  
101 15 227.2 28. März 2001 (28.03.2001) DE  
101 24 585.8 21. Mai 2001 (21.05.2001) DE

(81) Bestimmungsstaaten (*national*): AE, AG, AL, AM, AT,  
AU, AZ, BA, BB, BG, BR, BY, BZ, CA, CH, CN, CO, CR,  
CU, CZ, DE, DK, DM, DZ, EC, EE, ES, FI, GB, GD, GE,  
GH, GM, HR, HU, ID, IL, IN, IS, JP, KE, KG, KP, KR, KZ,  
LC, LK, LR, LS, LT, LU, LV, MA, MD, MG, MK, MN,  
MW, MX, MZ, NO, NZ, PH, PL, PT, RO, RU, SD, SE, SG,  
SI, SK, SL, TJ, TM, TR, TT, TZ, UA, UG, US, UZ, VN,  
YU, ZA, ZW.

(84) Bestimmungsstaaten (*regional*): ARIPO-Patent (GH,  
GM, KE, LS, MW, MZ, SD, SL, SZ, TZ, UG, ZW),  
eurasisches Patent (AM, AZ, BY, KG, KZ, MD, RU, TJ,  
TM), europäisches Patent (AT, BE, CH, CY, DE, DK,  
ES, FI, FR, GB, GR, IE, IT, LU, MC, NL, PT, SE, TR),  
OAPI-Patent (BF, BJ, CF, CG, CI, CM, GA, GN, GQ, GW,  
ML, MR, NE, SN, TD, TG).

(71) Anmelder (*für alle Bestimmungsstaaten mit Ausnahme  
von US*): **BAYER AKTIENGESELLSCHAFT** [DE/DE];  
51368 Leverkusen (DE).

(72) Erfinder; und

(75) Erfinder/Anmelder (*nur für US*): **STAWITZ, Josef-Wal-**  
**ter** [DE/DE]; Am Hagen 1, 51519 Odenthal (DE). **BER-**  
**NETH, Horst** [DE/DE]; Erfurter Str. 1, 51373 Leverkusen  
(DE). **BIERINGER, Thomas** [DE/DE]; Am Pützchen  
25, 51519 Odenthal (DE). **BRUDER, Friedrich-Karl**  
[DE/DE]; En De Siep 34, 47802 Krefeld (DE). **HAGEN,**  
**Rainer** [DE/DE]; Damaschkestr. 2a, 51373 Leverkusen  
(DE). **HASSENRÜCK, Karin** [DE/DE]; Schlehenweg

Veröffentlicht:

— mit internationalem Recherchenbericht

Zur Erklärung der Zweibuchstaben-Codes und der anderen  
Abkürzungen wird auf die Erklärungen ("Guidance Notes on  
Codes and Abbreviations") am Anfang jeder regulären Ausgabe  
der PCT-Gazette verwiesen.

(54) Title: OPTICAL DATA STORAGE DEVICE CONTAINING A CO-PHTHALOCYANIN COMPLEX IN THE OPTICALLY  
WRITABLE INFORMATION LAYER

(54) Bezeichnung: OPTISCHE DATENSPEICHER ENTHALTEND EIN CO-PHTHALOCYANIN-KOMPLEX IN DER MIT  
LICHT BESCHREIBBAREN INFORMATIONSSCHICHT

(57) Abstract: The invention relates to an optical data support which can be written once, to the use of co-phthalocyanin complexes  
as light-absorbing compounds in the optically writable information layer of optical data supports, especially for CD-Rs, and to the  
application of the aforementioned compounds to a polymer substrate, especially a polymer carbonate, by spin coating.

(57) Zusammenfassung: Die vorliegende Erfindung bezieht sich auf einen einmal beschreibbaren optischen Datenträger unter  
Verwendung von Co-Phthalocyanin-Komplexen als lichtabsorbierende Verbindungen in der mit Licht beschreibbaren Informati-  
onsschicht von optischen Datenträgern, insbesondere für CD-R, sowie die Applikation der oben genannten Verbindungen auf ein  
Polymersubstrat, insbesondere Polycarbonat, durch Spin-Coating.

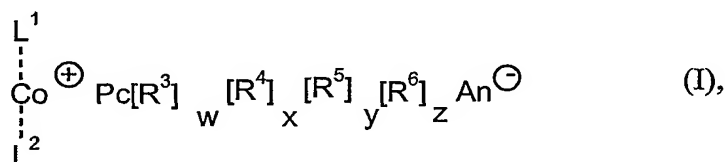


WO 02/25205 A1

**Optische Datenspeicher enthaltend ein Co-Phthalocyanin-Komplex in der mit Licht beschreibbaren Informationsschicht**

- 5 Die vorliegende Erfindung betrifft die Verwendung von Co-Phthalocyanin-Komplexen als lichtabsorbierende Verbindung in der mit Licht beschreibbaren Informationsschicht von einmal beschreibbaren optischen Datenträgern, optische Datenträger sowie ein Verfahren zu ihrer Herstellung.
- 10 Die einmal beschreibbare Compact Disk (CD-R) erlebt in letzter Zeit ein enormes Mengenwachstum. Dabei stellt die lichtabsorbierende Verbindung der Informationsschicht eine wesentliche Komponente des optischen Datenträgers dar, an die entsprechend hohe und vielfältige Anforderungen gestellt werden. Entsprechend aufwendig gestaltet sich nicht selten die Herstellung solcher Verbindungen (vgl. WO-A-
- 15 00/09522).
- Aufgabe der Erfindung ist demnach die Bereitstellung eines einfach zu synthetisierenden Phthalocyaninfarbstoffs, der die hohen Anforderungen (wie Lichtstabilität, günstiges Signal-Rausch-Verhältnis, hohe Schreibempfindlichkeit, schädigungsfreies
- 20 Aufbringen auf das Substratmaterial, u.ä.) für die Verwendung als lichtabsorbierende Verbindung in der Informationsschicht eines einmal beschreibbaren optischen Datenträgers (vornehmlich CD-R) erfüllt.
- Überraschender Weise wurde gefunden, dass Co-Phthalocyanin-Komplexe für den
- 25 genannten Zweck gut geeignet sind.
- Die Erfindung betrifft einen optischen Datenträger, enthaltend ein transparentes Substrat, auf dessen Oberfläche mindestens eine beschreibbare Informationsschicht, gegebenenfalls eine Reflexionsschicht, gegebenenfalls Zwischenschichten und/oder
- 30 gegebenenfalls eine Schutzschicht aufgebracht sind, dadurch gekennzeichnet, dass

die mit Licht beschreibbare Informationsschicht als lichtabsorbierende Verbindung wenigstens einen Co-Phthalocyanin-Komplex der Formel I enthält



5      worin

CoPc für Kobalt-(III)-Phthalocyanin steht, wobei

10       $L^1$  und  $L^2$       axiale, koordinativ gebundene Liganden des Kobalt-Zentralatoms sind  
und die Reste  $R^3$  bis  $R^6$  Substituenten des Phthalocyanins entsprechen,  
worin

$L^1$  und  $L^2$  unabhängig voneinander für ein Amin der Formel  $NR^0R^1R^2$  oder für ein  
Isonitril der Formel  $IC \equiv N^{\ominus} - R^{\oplus}$  steht,

15

worin

20       $R^0$ ,  $R^1$  und  $R^2$  unabhängig voneinander für Wasserstoff, Alkyl, Cycloalkyl, Alkenyl,  
Aryl oder Hetaryl stehen oder zwei der Reste  $R^0$  bis  $R^2$  zusammen mit  
dem N-Atom, an das sie gebunden sind, einen hydrierten, teilhydrier-  
ten, quasi aromatischen oder aromatischen Ring bilden, vorzugsweise  
einen 5- bis 7-gliedrigen Ring bilden, der gegebenenfalls weitere  
Heteroatome, insbesondere aus der Gruppe N, O und/oder S enthält,

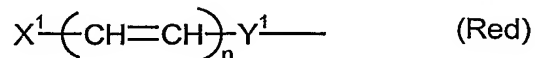
25      R      für Alkyl, Cycloalkyl, Alkenyl, Aryl oder Hetaryl steht,

$R^3$ ,  $R^4$ ,  $R^5$  und  $R^6$  unabhängig voneinander für Halogen, Cyano, Alkyl, Aryl, Alkyl-  
amino, Dialkylamino, Alkoxy, Alkylthio, Aryloxy, Arylthio,  $SO_3H$ ,

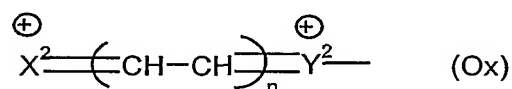
$\text{SO}_2\text{NR}^7\text{R}^8$ ,  $\text{CO}_2\text{R}^{12}$ ,  $\text{CONR}^7\text{R}^8$ ,  $\text{NH-COR}^{12}$  oder einen Rest  $-(\text{B})_m\text{-D}$  stehen,

5 B ein Brückenglied aus der Gruppe direkte Bindung,  $\text{CH}_2$ ,  $\text{CO}$ ,  $\text{CH}(\text{Alkyl})$ ,  $\text{C}(\text{Alkyl})_2$ ,  $\text{NH}$ ,  $\text{S}$ ,  $\text{O}$  oder  $-\text{CH}=\text{CH}-$  bedeutet, wobei  $(\text{B})_m$  eine chemisch sinnvolle Reihenfolge von Brückengliedern B bedeutet mit  $m = 1$  bis 10, vorzugsweise ist  $m = 1, 2, 3$  oder 4,

10 D für den monovalenten Rest eines Redoxsystems der Formel



oder



15 oder für einen Metallocenylrest oder Metallocenylcarbonylrest steht, wobei als Metallzentrum Titan, Mangan, Eisen, Ruthenium oder Osmium in Frage kommt,

20  $\text{X}^1$  und  $\text{X}^2$  unabhängig voneinander für  $\text{NR}'\text{R}''$ ,  $\text{OR}''$  oder  $\text{SR}''$  stehen,

$\text{Y}^1$  für  $\text{NR}'$ ,  $\text{O}$  oder  $\text{S}$  steht,  $\text{Y}^2$  für  $\text{NR}'$  steht,

n für 1 bis 10 steht und

25  $\text{R}'$  und  $\text{R}''$  unabhängig voneinander für Wasserstoff, Alkyl, Cycloalkyl, Aryl oder Hetaryl stehen, oder eine direkte Bindung oder eine Brücke zu einem der C-Atome der  $-(\text{CH}=\text{CH})_n$  bzw.  $=(\text{CH}-\text{CH})_n=$  Kette bilden,

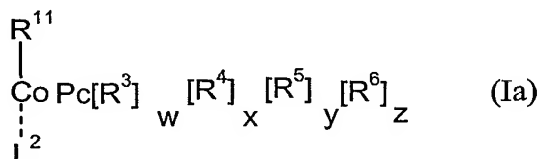
w, x, y und z unabhängig voneinander für 0 bis 12 stehen und  $w+x+y+z \leq 12$  sind,

5  $R^7$  und  $R^8$  unabhängig voneinander für Alkylamino, Hydroxyalkylamino, Dialkylamino, Bishydroxyalkylamino, Arylamino oder  $R^7$  und  $R^8$  gemeinsam mit dem N-Atom, an das sie gebunden sind, einen heterocyclischen 5-, 6- oder 7-gliedrigen Ring bilden, gegebenenfalls unter Beteiligung weiterer Heteroatome, insbesondere aus der Gruppe O, N und S, wobei  $NR^7R^8$ , insbesondere für Pyrrolidino, Piperidino oder Morpholino stehen,

10  $R^{12}$  für Alkyl, Aryl, Hetaryl oder Wasserstoff steht,

$An^-$  für ein Anion steht, insbesondere für Halogenid,  $C_1$ - bis  $C_{20}$ -Alkyl $COO^-$ , Formiat, Oxalat, Lactat, Glycolat, Citrat,  $CH_3OSO_3^-$ ,  $NH_2SO_3^-$ ,  $CH_3SO_3^-$ ,  $\frac{1}{2}SO_4^{2-}$  oder  $\frac{1}{3}PO_4^{3-}$  steht.

15 Der Co-Phthalocyanin Komplex der Formel I kann auch in Form der Formel Ia vorliegen



worin

20

$CoPc$ ,  $L^2$ , die Reste  $R^3$ - $R^6$  sowie die Indices  $w$ ,  $x$ ,  $y$  und  $z$  die gleiche Bedeutung besitzen wie in Formel (I) und

25  $R^{11}$  ein kovalent gebundener Rest des Kobalt-Zentralatoms ist und sich von den primären oder sekundären Aminen oder vom Isonitril in der Bedeutung von  $L^1$  ableitet, d.h. für  $-NR^1R^2$ , wobei  $R^1$  und  $R^2$  die oben angegebene Bedeutung besitzen oder für  $\text{---}\overset{\oplus}{C}\equiv N\text{---}R \text{ } An^\ominus$  steht.

Die nachfolgenden Ausführungen beziehen sich jedoch der Einfachheit halber alle auf die Verbindungen der Formel (I). Sie gelten aber natürlich in gleicher Weise auch für die Formel (Ia).

5 Als heterocyclische Amin-Liganden in der Bedeutung von  $L^1$  und  $L^2$  sind bevorzugt Morpholin, Piperidin, Piperazin, Pyridin, 2,2-Bipyridin, 4,4-Bipyridin, Pyridazin, Pyrimidin, Pyrazin, Imidazol, Benzimidazol, Isoxazol, Benzisoxazol, Oxazol, Benzoxazol, Thiazol, Benzthiazol, Chinolin, Pyrrol, Indol, 3,3-Dimethylindol, die jeweils am Stickstoffatom mit dem Kobaltatom koordiniert sind.

10

Die Alkyl-, Alkoxy-, Aryl- und heterocyclischen Reste können gegebenenfalls weitere Reste wie Alkyl, Halogen, Hydroxy, Hydroxyalkyl, Amino, Alkylamino, Dialkylamino, Nitro, Cyano, CO-NH<sub>2</sub>, Alkoxy, Alkoxycarbonyl, Morpholino, Piperidino, Pyrrolidino, Pyrrolidono, Trialkylsilyl, Trialkylsiloxo oder Phenyl tragen. Die Alkyl- und Alkoxyreste können gesättigt, ungesättigt, geradkettig oder verzweigt sein können, die Alkylreste können teil- oder perhalogeniert sein, die Alkyl- und Alkoxyreste können ethoxyliert oder propoxyliert oder silyliert sein. Benachbarte Alkyl und/oder Alkoxyreste an Aryl- oder heterocyclischen Resten können gemeinsam eine drei- oder viergliedrige Brücke ausbilden.

20

Bevorzugt sind Verbindungen der Formel (I), worin für die Reste  $R^0$  bis  $R^8$  und R, R', R'' und  $R^{12}$  sowie für die Liganden  $L^1$  und  $L^2$ :

25

Substituenten mit der Bezeichnung „Alkyl“ vorzugsweise C<sub>1</sub>-C<sub>16</sub>-Alkyl, insbesondere C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>-Alkyl bedeuten, die gegebenenfalls durch Halogen, wie Chlor, Brom, Fluor, Hydroxy, Cyano und/oder C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>-Alkoxy substituiert sind;

30

Substituenten mit der Bezeichnung „Alkoxy“ vorzugsweise C<sub>1</sub>-C<sub>16</sub>-Alkoxy, insbesondere C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>-Alkoxy bedeuten, die gegebenenfalls durch Halogen, wie Chlor, Brom, Fluor, Hydroxy, Cyano und/oder C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>-Alkyl substituiert sind;

Substituenten mit der Bezeichnung „Cycloalkyl“ vorzugsweise C<sub>4</sub>-C<sub>8</sub>-Cycloalkyl, insbesondere C<sub>5</sub> bis C<sub>6</sub>-Cycloalkyl bedeuten, die gegebenenfalls durch Halogen, wie Chlor, Brom oder Fluor, Hydroxy, Cyano und/oder C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>-Alkyl substituiert sind.

5 Substituenten mit der Bezeichnung „Alkenyl“ vorzugsweise C<sub>6</sub>-C<sub>8</sub>-Alkenyl bedeuten, die gegebenenfalls durch Halogen, wie Chlor, Brom oder Fluor, Hydroxy, Cyano und/oder C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>-Alkyl substituiert sind, insbesondere bedeutet Alkenyl Allyl,

10 Substituenten mit der Bedeutung „Hetaryl“ vorzugsweise für heterocyclische Reste mit 5- bis 7-gliedrigen Ringen stehen, die vorzugsweise Heteroatome aus der Gruppe N, S und/oder O enthalten und gegebenenfalls mit aromatischen Ringen anelliert sind oder gegebenenfalls weitere Substituenten tragen beispielsweise Halogen, Hydroxy, Cyano und/oder Alkyl, wobei besonders bevorzugt sind: Pyridyl, Furyl, Thienyl, Oxazolyl, Thiazolyl, Imidazolyl, Chinolyl, Benzoxazolyl, Benzthiazolyl und  
15 Benzimidazolyl,

Die Substituenten mit der Bezeichnung „Aryl“ vorzugsweise C<sub>6</sub>-C<sub>10</sub>-Aryl, insbesondere Phenyl oder Naphthyl bedeuten, die gegebenenfalls durch Halogen, wie F, Cl, Hydroxy, C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>-Alkyl, C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>-Alkoxy, NO<sub>2</sub> und/oder CN substituiert sind.

20

Bevorzugt werden Co-Phthalocyanin-Komplexe der Formel (I), worin

L<sup>1</sup> und L<sup>2</sup> unabhängig voneinander für Ammoniak, Methylamin, Ethylamin, Ethanolamin, Propylamin, Isopropylamin, Butylamin, Isobutylamin, tert. Butylamin,  
25 Pentylamin, tert. Amylamin, Benzylamin, Methylphenylhexylamin, Amino-propylamin, Aminoethylamin, 3-Dimethylaminopropylamin, 3-Diethylaminopropylamin, Diethylaminoethylamin, Dibutylaminopropylamin, Morpholino-propylamin, Piperidinopropylamin, Pyrrolidinopropylamin, Pyrrolidonopropylamin, 3-(Methyl-Hydroxyethylamino)propylamin, Methoxyethylamin,  
30 Ethoxyethylamin, Methoxypropylamin, Ethoxypropylamin, Methoxyethoxypropylamin, 3-(2-Ethylhexyloxy)propylamin, Isopropoxyisopropylamin,

Dimethylamin, Diethylamin, Diethanolamin, Dipropylamin, Diisopropylamin, Dibutylamin, Diisobutylamin, Di-tert. butylamin, Dipentylamin, Di-tert. amylamin, Bis(2-Ethylhexyl)amin, Bis(aminoethyl)amin, Bis(aminopropyl)amin, Bis(dimethylaminopropyl)amin, Bis(diethylaminopropyl)amin, Bis(diethylaminoethyl)amin, Bis(dibutylaminopropyl)amin, Di(morpholinopropyl)amin, Di(piperidinopropyl)amin, Di(pyrrolidinopropyl)amin, Di(pyrrolidonopropyl)amin, Bis(3-(Methyl-Hydroxyethylamino)propyl)amin, Dimethoxyethylamin, Diethoxyethylamin, Dimethoxypropylamin, Diethoxypropylamin, Di(methoxyethoxyethyl)amin, Di(methoxyethoxypropyl)amin, Bis(3-(2-Ethylhexyloxy)propyl)amin, Di(isopropoxyisopropyl)amin, Tripropylamin, Tri(methoxyethoxyethyl)amin, Tri(methoxyethoxypropyl)amin, Diethylaminoethylpiperazin, Dipropylaminoethylpiperazin, Morpholin, Piperidin, Piperazin, Pyridylamin, 2-Thiazolylamin, 2-Benzthiazolylamin, 2-Benzoxazolylamin, 3-Iminoisoindoleninylamin, Pyridin, Propylpyridin, Butylpyridin, 2,2-Bipyridin, 4,4-Bipyridin, Pyridazin, Pyrimidin, Pyrazin, Imidazol, Benzimidazol, Isoxazol, Benzisoxazol, Oxazol, Benzoxazol, Thiazol, Benzthiazol, Chinolin, Pyrrol, Indol, 3,3-Dimethylindol, Aminopyridin, Anilin, p-Toluidin, p-tert. Butylanilin, p-Anisidin, Isopropylanilin, Butoxyanilin oder Naphtylamin stehen,

oder

$L^1$  und  $L^2$  unabhängig voneinander für Methylisonitril, Ethylisonitril, Ethanolisonitril, Propylisonitril, Isopropylisonitril, Butylisonitril, Isobutylisonitril, tert. Butylisonitril, Pentylisonitril, tert-Amylisonitril, Benzylisonitril, Methylphenylhexylisonitril, Aminopropylisonitril, Aminoethylisonitril, 3-Dimethylaminopropylisonitril, 3-Diethylaminopropylisonitril, Diethylaminoethylisonitril, Dibutylaminpropylisonitril, Morpholinopropylisonitril, Piperidinopropylisonitril, Pyrrolidinopropylisonitril, Pyrrolidonopropylisonitril, 3-(Methylhydroxyethylamino)propylisonitril, Methoxyethylisonitril, Ethoxyethylisonitril, Methoxypropylisonitril, Ethoxypropylisonitril, Methoxyethoxypropyl-

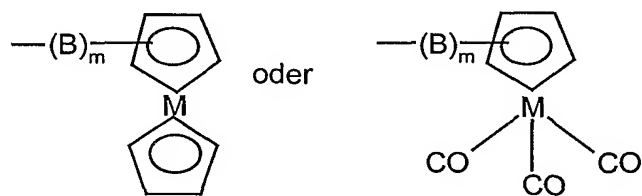


isonitril, 3-(2-Ethylhexyloxy)propylisonitril, Isopropoxyisopropylisonitril, Dimethylisonitril, Diethylisonitril, Diethanolisonitril, Dipropylisonitril, Diisopropylisonitril, Dibutylisonitril, Diisobutylisonitril, Di-tert.-butylisonitril, Dipentylisonitril, Di-tert.-amylisonitril, Bis(2-Ethylhexyl)isonitril, Bis(aminoethyl)isonitril, Bis(aminopropyl)isonitril, Bis(dimethylaminopropyl)isonitril, Bis(diethylaminopropyl)isonitril, Bis(diethylaminoethyl)isonitril, Bis(dibutylaminopropyl)isonitril, Di(morpholinopropyl)isonitril, Di(piperidinopropyl)isonitril, Di(pyrrolidinopropyl)isonitril, Di(pyrrolidonopropyl)isonitril, Bis(3-(Methyl-hydroxyethylamino)propyl)isonitril, Dimethoxyethylisonitril, Diethoxyethylisonitril, Dimethoxypropylisonitril, Diethoxypropylisonitril, Di(methoxyethoxyethyl)isonitril, Di(methoxyethoxypropyl)isonitril, Bis(3-(2-Ethylhexyloxy)propyl)isonitril, Di(isopropoxyisopropyl)isonitril, Tripropylisonitril, Tri(methoxyethoxyethyl)isonitril, Tri(methoxyethoxypropyl)isonitril, Pyridylisonitril, 2-Thiazolylisonitril, 2-Benzthiazolylisonitril, 2-Benzoxazolylisonitril, 3-Iminoisoindoleninylisonitril, Phenylisonitril, p-tert.-Butylphenylisonitril, p-Methoxyphenylisonitril, Isopropylphenylisonitril, Butoxyphenylisonitril oder Naphtylisonitril stehen,

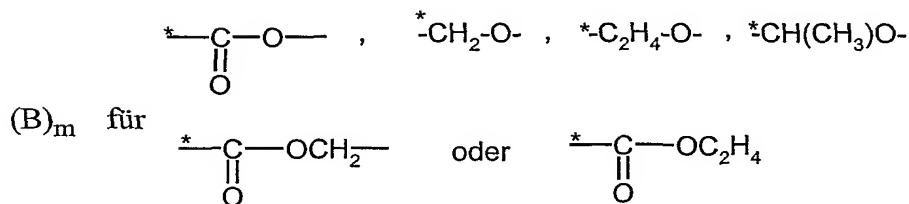
$R^3$ ,  $R^4$ ,  $R^5$  und  $R^6$  unabhängig voneinander für Chlor, Fluor, Brom, Iod, Cyano, Methyl, Ethyl, Propyl, Isopropyl, Butyl, Isobutyl, tert. Butyl, Pentyl, tert. Amyl, Hydroxyethyl, 3-Dimethylaminopropyl, 3-Diethylaminopropyl, Phenyl, p-tert.-Butylphenyl, p-Methoxyphenyl, Isopropylphenyl, Trifluormethylphenyl, Naphthyl, Methylamino, Ethylamino, Propylamino, Isopropylamino, Butylamino, Isobutylamino, tert. Butylamino, Pentylamino, tert. Amylamino, Benzylamino, Methylphenylhexylamino, Hydroxyethylamino, Aminopropylamino, Aminoethylamino, 3-Dimethylaminopropylamino, 3-Diethylaminopropylamino, Diethylaminoethylamino, Dibutylaminopropylamino, Morpholinopropylamino, Piperidinopropylamino, Pyrrolidinopropylamino, Pyrrolidonopropylamino, 3-(Methyl-Hydroxyethylamino)propylamino, Methoxyethylamino, Ethoxyethylamino, Methoxypropylamino, Ethoxypropylamino, Methoxyethoxypropylamino, 3-(2-Ethyl-

hexyloxy)propylamino, Isopropoxypropylamino, Dimethylamino, Diethyl-  
 amino, Diethanolamino, Dipropylamino, Diisopropylamino, Dibutylamino,  
 Diisobutylamino, Di-tert. butylamino, Dipentylamino, Di-tert. amylamino,  
 Bis(2-Ethylhexyl)amino, Bis(aminopropyl)amino, Bis(aminoethyl)amino,  
 5 Bis(3-Dimethylaminopropyl)amino, Bis(3-Diethylaminopropyl)amino, Bis-  
 (Diethylaminoethyl)amino, Bis(dibutylaminopropyl)amino, Di(morpholino-  
 propyl)amino, Di(piperidinopropyl)amino, Di(pyrrolidinopropyl)amino, Di-  
 (pyrrolidonopropyl)amino, Bis(3-(Methyl-hydroxyethylamino)propyl)amino,  
 Dimethoxyethylamino, Diethoxyethylamino, Dimethoxypropylamino, Di-  
 10 ethoxypropylamino, Di(methoxyethoxyethyl)amino, Di(methoxyethoxy-  
 propyl)amino, Bis(3-(2-Ethylhexyloxy)propyl)amino, Di(isopropoxy-  
 isopropyl)amino, Methoxy, Ethoxy, Propyloxy, Isopropoxy, Butyloxy,  
 Isobutyloxy, tert. Butyloxy, Pentyloxy, tert. Amyloxy, Methoxyethoxy,  
 Ethoxyethoxy, Methoxypropyloxy, Ethoxypropyloxy, Methoxyethoxypro-  
 15 pyloxy, 3-(2-Ethylhexyloxy)propyloxy, Methylthio, Ethylthio, Propylthio,  
 Isopropylthio, Butylthio, Isobutylthio, tert.-Butylthio, Pentythio, tert.-  
 Amylthio, Phenyl, Methoxyphenyl, Trifluormethylphenyl, Naphthyl,  
 $\text{CO}_2\text{R}^{12}$ ,  $\text{CONR}^7\text{R}^8$ ,  $\text{NH-COR}^{12}$ ,  $\text{SO}_3\text{H}$ ,  $\text{SO}_2\text{NR}^7\text{R}^8$ , oder für einen Rest der  
 Formel

20



worin



25

wobei der Stern (\*) die Anknüpfung mit dem 5-Ring anzeigt,

M für ein Mn oder Fe-Kation steht,

5 w, x, y und z unabhängig voneinander für 0 bis 8 stehen und  $w+x+y+z \leq 12$  sind,

An<sup>-</sup> für Chlorid, Bromid, Fluorid, C<sub>1</sub>- bis C<sub>20</sub>-AlkylCOO<sup>-</sup>, Formiat, Oxalat, Lactat, Glycolat, Citrat, CH<sub>3</sub>OSO<sub>3</sub><sup>-</sup>, NH<sub>2</sub>SO<sub>3</sub><sup>-</sup>, CH<sub>3</sub>SO<sub>3</sub><sup>-</sup>,  $\frac{1}{2}$  SO<sub>4</sub><sup>2-</sup> oder  $\frac{1}{3}$  PO<sub>4</sub><sup>3-</sup> steht,

10

NR<sup>7</sup>R<sup>8</sup> für Amino, Methylamino, Ethylamino, Propylamino, Isopropylamino, Butylamino, Isobutylamino, tert. Butylamino, Pentylamino, tert. Amylamino, Benzylamino, Methylphenylhexylamino, 2-Ethyl-1-hexylamino, Hydroxyethylamino, Aminopropylamino, Aminoethylamino, 3-Dimethylaminopropylamino, 3-Diethylaminopropylamino, Morpholinopropylamino, Piperidinopropylamino, Pyrrolidinopropylamino, Pyrrolidonopropylamino, 3-(Methyl-Hydroxyethylamino)propylamino, Methoxyethylamino, Ethoxyethylamino, Methoxypropylamino, Ethoxypropylamino, Methoxyethoxypropylamino, 3-(2-Ethylhexyloxy)propylamino, Isopropyloxyisopropylamino, Dimethylamino, Diethylamino, Dipropylamino, Diisopropylamino, Dibutylamino, Diisobutylamino, Di-tert. butylamino, Dipentylamino, Di-tert. Amylamino, Bis(2-Ethylhexyl)amino, Dihydroxyethylamino, Bis(aminopropyl)amino, Bis(aminoethyl)amino, Bis(3-Dimethylaminopropyl)amino, Bis(3-Diethylaminopropyl)amino, Di(morpholinopropyl)amino, Di(piperidinopropyl)amino, Di(pyrrolidinopropyl)amino, Di(pyrrolidonopropyl)amino, Bis(3-(Methyl-Hydroxyethylamino)propyl)amino, Dimethoxyethylamino, Diethoxyethylamino, Dimethoxypropylamino, Diethoxypropylamino, Di(methoxyethoxypropyl)amino, Bis(3-(2-Ethylhexyloxy)propyl)amino, Di(isopropyloxyisopropyl)amino, Anilino, p-Toluidino, p-tert. Butylanilino, p-Anisidino, Isopropylanilino oder Naphtylamino stehen oder NR<sup>7</sup>R<sup>8</sup> für Pyrrolidino, Piperidino, Piperazino oder Morpholino stehen,

15

20

25

30

R<sup>12</sup> für Wasserstoff, Methyl, Ethyl, Propyl, Isopropyl, Butyl, Isobutyl, ter.-Butyl, Pentyl, tert.-Amyl, Phenyl, p-tert.-Butylphenyl, p-Methoxyphenyl, Isopropylphenyl, p-Trifluormethylphenyl, Cyanophenyl, Naphthyl, 4-Pyridinyl, 2-Pyridinyl, 2-Chinolinyl, 2-Pyrrolyl oder 2-Indolyl steht,

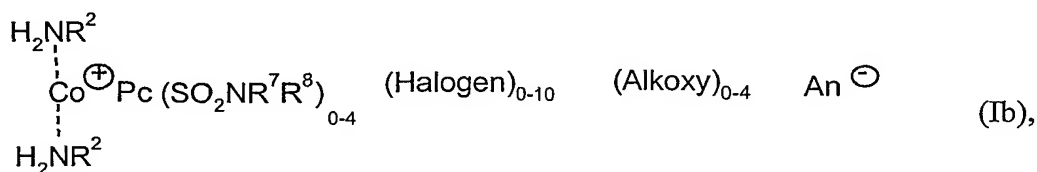
wobei

die Alkyl-, Alkoxy-, Aryl- und heterocyclischen Reste gegebenenfalls weitere Reste wie Alkyl, Halogen, Hydroxy, Hydroxyalkyl, Amino, Alkylamino, Dialkylamino, Nitro, Cyano, CO-NH<sub>2</sub>, Alkoxy, Alkoxycarbonyl, Morpholino, Piperidino, Pyrrolidino, Pyrrolidono, Trialkylsilyl, Trialkylsiloxo oder Phenyl tragen können, die Alkyl- und/oder Alkoxyreste gesättigt, ungesättigt, geradkettig oder verzweigt sein können, die Alkylreste teil- oder perhalogeniert sein können, die Alkyl- und/oder Alkoxyreste ethoxyliert oder propoxyliert oder silyliert sein können, benachbarte Alkyl und/oder Alkoxyreste an Aryl- oder heterocyclischen Resten gemeinsam eine drei- oder viergliedrige Brücke ausbilden können.

Unter Redoxsystemen im Rahmen dieser Anmeldung werden insbesondere die in der Angew. Chem. 1978, S. 927 und in Topics of Current Chemistry, Vol. 92, S. 1 (1980), beschriebenen Redoxsystemen verstanden.

Bevorzugt sind p-Phenylendiamine, Phenothiazine, Dihydrophenazine, Bipyridiniumsalze (Viologene), Chinodimethane.

Besonders bevorzugt sind solche Co-Komplexe der Formel I, die der Formel (Ib) entsprechen



worin

Halogen für Chlor, Brom oder Fluor steht,

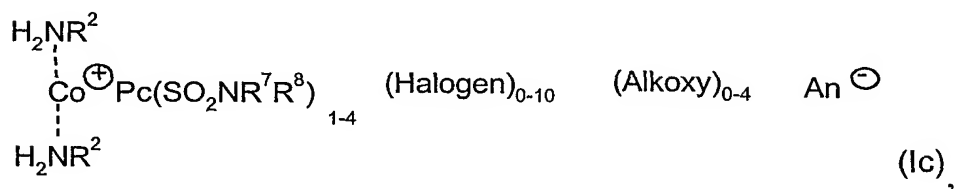
5 Alkoxy für C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>-Alkoxy steht,

R<sup>7</sup> und R<sup>8</sup> unabhängig voneinander die oben angegebenen Bedeutungen haben,

An<sup>⊖</sup>, CoPc und R<sup>2</sup> ebenfalls die oben angegebene Bedeutung haben.

10

Die Erfindung betrifft im übrigen auch die Verbindung der Formel Ic



worin

15

Halogen für Chlor, Brom oder Fluor steht,

Alkoxy für C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>-Alkoxy steht, das gegebenenfalls substituiert ist,

20 R<sup>7</sup> und R<sup>8</sup> unabhängig voneinander die obige Bedeutung besitzen,

und die übrigen Substituenten die oben angegebene Bedeutung besitzen.

25

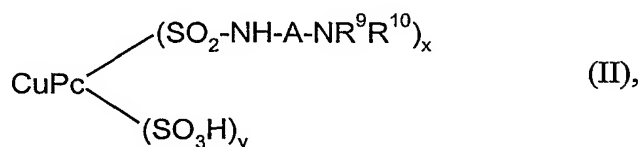
Die Erfindung betrifft auch ein Verfahren zur Herstellung von Verbindungen der Formel (Ic), das dadurch gekennzeichnet ist, dass man ein mit Sulfonamidgruppen der Formel SO<sub>2</sub>NR<sup>7</sup>R<sup>8</sup>, wobei R<sup>7</sup> und R<sup>8</sup> die oben genannte Bedeutung haben, und gegebenenfalls Halogen- und/oder Alkoxy-substituentes Co-Phthalocyanin oxidiert und mit Aminen L<sup>1</sup> und L<sup>2</sup> umsetzt.

Bevorzugt erfolgt die Herstellung ausgehend von einem gegebenenfalls mit Halogen und/oder Alkoxy substituierten Co-Phthalocyanin durch Sulfochlorierung mit Chlorsulfonsäure und Thionylchlorid bei 50-130°C und Umsetzung mit dem entsprechenden Amin zum Amid in Wasser bei pH 8-12 bei Raumtemperatur bis 100°C. Die  
 5 anschließende Einführung der axialen Amin-Substituenten erfolgt vorzugsweise in bekannter Weise unter oxidativen Bedingungen, z.B. Chlor oder Luft, vorzugsweise Luft, im Falle von Luft in Gegenwart von überschüssigem Amin (s. Beispiel 13). Im Falle von Chlor erfolgt erst die Oxidation, dann wird das Amin zugesetzt.

10 Besonders bevorzugt enthält die mit Licht beschreibbare Informationsschicht als lichtabsorbierende Verbindungen neben einer Verbindung der Formel I zusätzlich noch wenigstens ein anderes gegebenenfalls substituiertes Phthalocyanin mit oder ohne Zentralatom.

15 Als Zentralatom kommt beispielsweise eines aus der Gruppe Si, Zn, Al, Cu, Pd, Pt, Au und Ag, insbesondere Cu und Pd in Frage.

Besonders bevorzugt sind beispielsweise die aus DE-A 19 925 712 bekannten sulfonamidsubstituierten Cu-Phthalocyanine. Besonders bevorzugt sind solche der Formel  
 20 II



worin

25 CuPc für einen Kupferphthalocyanin-Rest steht,

A für ein gegebenenfalls substituiertes geradkettiges oder verzweigtes C<sub>2</sub>-C<sub>6</sub>-Alkylen wie z.B. Ethylen, Propylen, Butylen, Pentylen, Hexylen steht,

5  $R^9$  und  $R^{10}$  unabhängig voneinander für Wasserstoff oder jeweils gegebenenfalls substituiertes geradkettiges oder verzweigtes  $C_1$ - $C_6$ -Alkyl wie z.B. Methyl, Ethyl, Propyl, Butyl, Pentyl, Hexyl, insbesondere für substituiertes  $C_1$ - $C_6$ -Hydroxyalkyl sowie für unsubstituiertes  $C_1$ - $C_6$ -Alkyl stehen,

10 oder  $R^1$  und  $R^2$  zusammen mit dem N-Atom, an das sie gebunden sind, einen heterocyclischen 5- oder 6-Ring bilden, der gegebenenfalls ein weiteres Heteroatom, z.B. S, N oder O enthält,

x für 2,0 bis 4,0 steht,

15 y für 0 bis 1,5 steht und

die Summe von x und y 2,0 bis 4,0, bevorzugt 2,5 bis 4,0 beträgt.

Besonders bevorzugt eignen sich als Mischungskomponente solche der Formel (II), die der Formel (IIa) entsprechen

20 
$$\text{CuPc} - [\text{SO}_2\text{NH}-\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{N}(\text{CH}_2)_3] \quad (\text{IIa}),$$

worin

CuPc Kupfer-Phthalocyanin bedeutet.

25 Als weitere bevorzugte zusätzliche lichtabsorbierende Verbindungen eignen sich die Sulfonamid- bzw. Amido-substituierten Phthalocyanine wie sie beispielsweise aus EP-A-519 395 bekannt sind.

30 Bevorzugt beträgt im Falle von Mischungen verschiedener lichtabsorbierender Verbindungen der Anteil der Verbindungen der Formel (I) davon 10 bis 90 Gew.-%.

Besonders bevorzugt ist eine Mischung der Formeln (I) und (II) in einem Gewichtsverhältnis von 10:90 bis 90:10, bevorzugt 20:80 bis 80:20, besonders bevorzugt von 40:60 bis 60:40.

5

Die Informationsschicht kann neben der lichtabsorbierenden Verbindung noch Binder, Netzmittel, Stabilisatoren, Verdünner und Sensibilisatoren sowie weitere Bestandteile enthalten.

10 Die Substrate können aus optisch transparenten Kunststoffen hergestellt sein, die, wenn notwendig, eine Oberflächenbehandlung erfahren haben. Bevorzugte Kunststoffe sind Polycarbonate und Polyacrylate, sowie Polycycloolefine oder Polyolefine.

15 Die Reflektionsschicht kann aus jedem Metall bzw. Metallegierung, die üblicherweise für beschreibbare optische Datenträger benutzt werden, hergestellt sein. Geeignete Metalle bzw. Metallegierungen können aufgedampft und gesputtert werden und enthalten z.B. Gold, Silber, Kupfer, Aluminium und deren Legierungen untereinander oder mit anderen Metallen.

20 Die mögliche Schutzschicht über der Reflektionsschicht kann aus UV-härtenden Acrylaten bestehen.

Eine mögliche Zwischenschicht, die die Reflektionsschicht beispielsweise vor Oxidation schützt, kann ebenfalls vorhanden sein.

25

Die Erfindung betrifft weiterhin ein Verfahren zur Herstellung der erfindungsgemäßen optischen Datenträger, das dadurch gekennzeichnet ist, dass man auf ein transparentes Substrat, die mit Licht beschreibbare Informationsschicht durch Beschichten mit wenigstens einem Co-Phthalocyaninkomplex der Formel I, gegebenenfalls in Kombination mit geeigneten Bindern, Additiven und Lösungsmitteln auf-

30



bringt und weiter gegebenenfalls mit einer Reflexionsschicht, gegebenenfalls weiteren Zwischenschichten und gegebenenfalls einer Schutzschicht versieht.

5 Die Beschichtung des Substrates mit der lichtabsorbierenden Verbindung der Formel I gegebenenfalls in Kombination mit weiteren Farbstoffen, Bindern und/oder Lösungsmitteln erfolgt vorzugsweise durch Spin Coating.

10 Für das Coating wird die lichtabsorbierende Verbindung der Formel I vorzugsweise mit oder ohne Additive in einem geeigneten Lösungsmittel oder Lösungsmittelgemisch gelöst, so dass die Verbindung der Formel I 100 oder weniger, beispielsweise 10 bis 20 Gewichtsanteile auf 100 Gewichtsanteile Lösungsmittel ausmacht. Die beschreibbare Informationsschicht wird danach vorzugsweise bei reduziertem Druck durch Sputtern oder Aufdampfen metallisiert (Reflexionsschicht) und eventuell anschließend mit einem Schutzlack (Schutzschicht) oder einem weiteren Substrat  
15 oder einer Abdeckschicht versehen. Mehrschichtige Anordnungen mit teiltransparenter Reflexionsschicht sind auch möglich.

Lösungsmittel bzw. Lösungsmittelgemische für das Beschichten der lichtabsorbierenden Verbindungen der Formel I oder ihrer Mischungen mit Additiven und/oder  
20 Bindemitteln sowie anderen lichtabsorbierenden Verbindungen werden einerseits nach ihrem Lösungsvermögen für die lichtabsorbierende Verbindung der Formel I und die anderen Zusätze und andererseits nach einem minimalen Einfluss auf das Substrat ausgewählt. Geeignete Lösungsmittel, die einen geringen Einfluss auf das Substrat haben, sind beispielsweise Alkohole, Ether, Kohlenwasserstoffe, halogenierte Kohlenwasserstoffe, Alkoxyalkohole, Ketone. Beispiele solcher Lösungsmittel  
25 sind Methanol, Ethanol, Propanol, 2,2,3,3-Tetrafluorpropanol, Butanol, Diacetonalkohol, Benzylalkohol, Tetrachloroethan, Dichlormethan, Diethylether, Dipropylether, Dibutylether, Methyl-tert.-butylether, Methoxyethanol, Ethoxyethanol, 1-Methyl-2-propanol, Methylethylketon, 4-Hydroxy-4-methyl-2-pentanone, Hexan,  
30 Cyclohexan, Ethylcyclohexan, Octan, Benzol, Toluol, Xylol. Bevorzugte Lösungs-

mittel sind Kohlenwasserstoffe und Alkohole, da sie den geringsten Einfluß auf das Substrat ausüben.

5 Geeignete Additive für die beschreibbare Informationsschicht sind Stabilisatoren, Netzmittel, Binder, Verdünner und Sensibilisatoren.

**Beispiele:**

Die folgenden präparativen Beispiele zeigen die Herstellung der erfindungsgemäß zu verwendenden Farbstoffe.

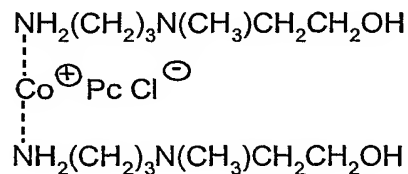
5

**Beispiel 1**

115 g Co-Phthalocyanin wurden bei Raumtemperatur in 1 l trockenem Chlorbenzol eingetragen. Es wurden 16 g Chlor eingeleitet und 30 min nachgerührt. Nach dem Entfernen des überschüssigen Chlors durch Ausblasen mit Stickstoff wurden 90 g 3-(Methyl-hydroxyethyl)propylamin zugetropft. Es wurde 30 min bei 90°C nachgerührt und nach dem Abkühlen auf Raumtemperatur abgenutscht. Es wurde mit 1 l Chlorbenzol und 1 l Wasser nachgewaschen und der erhaltene Farbstoff im Vakuum getrocknet.

15

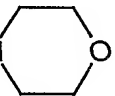
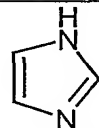
Man erhielt 156 g Farbstoff der Formel



$\lambda_{\text{max}}$  670nm(NMP).

20

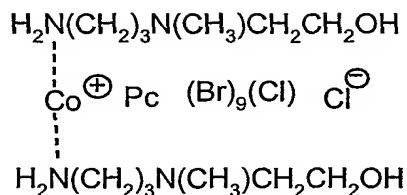
Analog wurden folgende Verbindungen hergestellt, in dem man das 3-(Methyl-hydroxyethyl)propylamin durch ein anderes Amin oder Isonitril in gleicher molarer Menge ersetzte.

Bei- spiel	L <sup>1</sup> und L <sup>2</sup>	R <sup>3</sup> -R <sup>6</sup>	$\lambda_{\max}$ nm (NMP)
2	H <sub>2</sub> N-(CH <sub>2</sub> ) <sub>17</sub> CH <sub>3</sub>	H	664
3	H <sub>2</sub> N(CH <sub>2</sub> ) <sub>3</sub> -N 	H	669
4	H <sub>2</sub> N(CH <sub>2</sub> ) <sub>3</sub> N(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	H	668
5	H <sub>2</sub> N(CH <sub>2</sub> ) <sub>3</sub> OCH <sub>2</sub> CH <sub>3</sub>	H	665
6	H <sub>2</sub> N-CH(CH <sub>3</sub> )-CH <sub>2</sub> -(OCH <sub>2</sub> -CH(CH <sub>3</sub> )) <sub>3</sub> -NH <sub>2</sub>	H	666
7	H <sub>2</sub> N-CH(CH <sub>3</sub> )-CH <sub>2</sub> O-(CH(CH <sub>3</sub> )-CH <sub>2</sub> -O) <sub>12</sub> -H	H	666
8	H <sub>2</sub> N(CH <sub>2</sub> ) <sub>3</sub> O-CH <sub>2</sub> -CH(CH <sub>2</sub> CH <sub>3</sub> )-(CH <sub>2</sub> ) <sub>3</sub> CH <sub>3</sub>	H	667
9		H	664
10	C≡N-C(CH <sub>3</sub> ) <sub>3</sub>	H	665

**Beispiel 11**

- 5 80 g Nonabrom-Chlor-Co-Phthalocyanin wurden bei Raumtemperatur in 1 l trockenem Chlorbenzol eingetragen. Es wurden 5 g Chlor eingeleitet und 30 min nachgerührt. Nach dem Entfernen des überschüssigen Chlor durch Ausblasen mit Stickstoff wurden 28 g 3-(Methyl-hydroxyethyl)propylamin zugetropft. Es wurde 30 min bei
- 10 mit 1 l Chlorbenzol und 1 l Wasser nachgewaschen und der Farbstoff im Vakuum getrocknet.

Man erhielt 88 g Farbstoff der Formel



$\lambda_{\text{max}}$  684nm(NMP).

5

Analog wurden folgende Verbindungen hergestellt, in dem man entsprechend die molare Menge eines anderen Amins einsetzte.

Bei- spiele	L <sup>1</sup> und L <sup>2</sup>	R <sup>3</sup>	R <sup>4</sup>	R <sup>5</sup> -R <sup>8</sup>	$\lambda_{\text{max}}$ nm (NMP)
12	Methoxy-ethoxy- propylamin	Br <sub>9</sub>	Cl	H	685
13	3-Dimethyl- aminopropyl-amin	Br <sub>9</sub>	Cl	H	684

10

#### Beispiel 14

Sulfochlorierung:

131 g Cobalt-Phthalocyanin 98,8 % wird innerhalb von 30 min in  
 394 ml Chlorsulfonsäure 98 % eingetragen. Der Ansatz wird innerhalb von  
 25 min auf 119°C aufgeheizt, 4h bei 119°C gerührt, auf 85°C  
 abgekühlt und bei 85-88°C innerhalb von 2 h  
 120 ml Thionylchlorid (mind 98 %) zugetropft; danach wird innerhalb von  
 20 min auf 90-92°C aufgeheizt, 4h bei 90-92°C gerührt, anschließend  
 auf RT gerührt.

**Ausbeute: 802 g Schmelze**

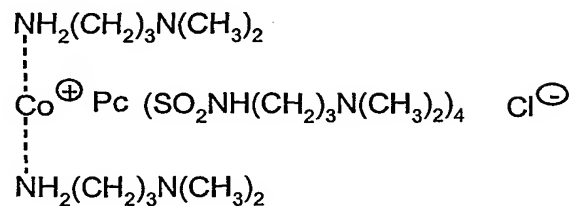
**Amidbildung:**

381 g Schmelze wurden auf  
1700 g Eis ausgetragen. Temperatur =  $-5^{\circ}\text{C}$ . Das ausgefallene Sulfochlorid wurde sofort abgesaugt, mit  
1000 ml Eiswasser neutralgewaschen und gut trockengesaugt. Das feuchte Sulfochlorid wurde sofort weiterverarbeitet.  
750 g Eis und  
750 ml Eiswasser wurden vorgelegt. In diese Mischung wurde unter Rühren das Sulfochlorid schnell eingetragen. Danach wurde  
39 g 3-Dimethylaminopropylamin zugegeben. Das Gemisch wurde anschließend innerhalb von 60 min auf  $80^{\circ}\text{C}$  aufgeheizt. Den pH-Wert dabei mittels 10 %iger NaOH-Lösung bei pH 10.00 gehalten und den Versuch 45 Minuten bei  $80^{\circ}\text{C}$  und pH 10,0 nachgerührt.  
Nach dem Abkühlen auf Raumtemperatur wurde abgesaugt, mit 1000 ml Wasser portionsweise gewaschen.  
Das Produkt wurde im Vakuumtrockenschrank getrocknet.  
Ausbeute: 126,00 g

Einführung der axialen Liganden

- 5     354 g 3-Dimethylaminopropylamin und 14 g  $\text{NH}_4\text{Cl}$  wurden  $90^{\circ}\text{C}$  1 Stunde erwärmt. Nach Abkühlen auf Raumtemperatur wurden 247 g Co-Phthalocyanin-tetrasulfo-3-dimethylaminopropylamid und 1 g  $\text{CoCl}_2$  zugegeben. Es wurde dann 10 Stunden Luft eingeleitet. Die Mischung wurde auf 5 l Wasser gegeben und abfiltriert. Der Farbstoff wurde im Vakuum getrocknet.

Man erhielt 275 g Farbstoff der Formel



## 5 Beispiel 15

Sulfochlorierung:

131 g	Cobalt-Phthalocyanin 98,8 % wird innerhalb von 30 min in
394 ml	Chlorsulfonsäure 98 % eingetragen. Der Ansatz wird innerhalb von 25 min auf 119°C aufgeheizt, 4h bei 119°C gerührt, auf 85°C abgekühlt und bei 85-88°C innerhalb von 2 h
120 ml	Thionylchlorid (mind 98 %) zugetropft; danach wird innerhalb von 20 min auf 90-92°C aufgeheizt und 4h bei 90-92°C gerührt, anschließend auf RT gerührt.

**Ausbeute: 802 g Schmelze**

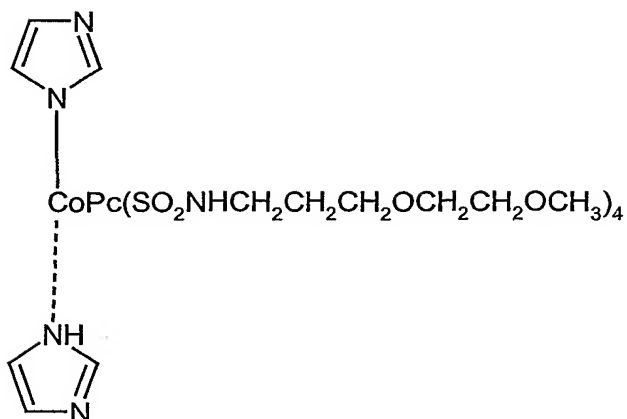
Amidbildung:

381 g Schmelze wurden auf  
 1700 g Eis ausgetragen. Temperatur = -5°C. Das ausgefallene Sulfochlorid wurde sofort abgesaugt, mit  
 1000 ml Eiswasser neutralgewaschen und gut trockengesaugt. Das feuchte Sulfochlorid wurde sofort weiterverarbeitet.  
 750 g Eis und  
 750 ml Eiswasser werden vorgelegt. In diese Mischung wird unter Rühren das Sulfochlorid schnell eingetragen. Danach wird  
 54 g Methoxyethoxypropylamin zugegeben. Das Gemisch wird anschließend innerhalb von 60 min auf 80°C aufgeheizt. Der pH-Wert wurde dabei mittels 10 %iger NaOH-Lösung bei pH 10.00 gehalten und 45 Minuten bei 80°C und pH 10,0 nachgerührt.  
 Nach dem Abkühlen auf Raumtemperatur wird abgesaugt, mit 1000 ml Wasser portionsweise gewaschen.  
 Das Produkt wurde im Vakuum getrocknet.  
 Ausbeute: 112 g

Einführung axialer Liganden

Eine Mischung von  
 199 g Co-Phthalocyanin-tetrasulfo-methoxyethoxypropylamid  
 280 g Imidazol wurde mit DMF  
 ca. 1000 ml aufgefüllt und 24 h im offenen Becherglas gerührt.  
 Zu dieser Mischung wurde  
 1500 ml Wasser zugetropft. Das Produkt wurde abfiltriert und anschließend mit  
 1000 ml Wasser gewaschen. Der Farbstoff wurde im Vakuum getrocknet.  
 Man erhielt 197 g Farbstoff der Formel





$\lambda_{\max}$  670 nm (NMP)

### **Beispiel 16**

5

Sulfochlorierung:

131 g Cobalt-Phthalocyanin 98,8 % wurde innerhalb von 30 min in  
 288 ml Chlorsulfonsäure 98 % eingetragen. Das Gemisch wurde auf 75°C  
 aufgeheizt und 4 h bei 75°C gerührt. Nach dem Aufheizen auf 80°C  
 wurde innerhalb von 2 h  
 120 ml Thionylchlorid (mind 98 %) zugetropft. Das Gemisch wurde nach 4h  
 bei 80°C gerührt und anschließend auf RT gerührt.

**Ausbeute: 712 g Schmelze**

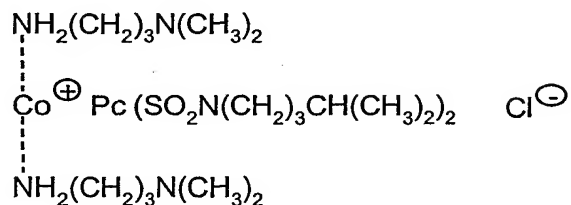
**Amidbildung:**

402 g Schmelze wurden auf  
1700 g Eis ausgetragen. Das ausgefallene Sulfochlorid wurde sofort abgesaugt, mit  
1000 ml Eiswasser neutralgewaschen und gut trockengesaugt. Das feuchte Sulfochlorid wurde sofort weiterverarbeitet.  
750 g Eis und  
750 ml Eiswasser wurden vorgelegt. In diese Mischung wurde unter Rühren das Sulfochlorid schnell eingetragen. Danach wurde  
20 g Diisobutylamin zugegeben. Das Gemisch wurde anschließend innerhalb von 60 min auf 80°C aufgeheizt. Der pH-Wert wurde dabei mittels 10 %iger NaOH-Lösung bei pH 10.00 gehalten und dann 45 Minuten bei 80°C und pH 10,0 nachgerührt.  
Nach dem Abkühlen auf Raumtemperatur wurde abgesaugt und mit 1000 ml VE-Wasser portionsweise gewaschen.  
Das Produkt wurde im Vakuum getrocknet.  
Ausbeute: 95 g

Einführung axialer Liganden

- 5     354 g 3-Dimethylaminopropylamin und 14 g  $\text{NH}_4\text{Cl}$  wurden 90°C 1 Stunde erwärmt. Nach Abkühlen auf Raumtemperatur wurden 219 g Co-Phthalocyanin-trisulfo-diisobutylamid und 1 g  $\text{CoCl}_2$  zugegeben. Es wurde dann 10 Stunden Luft eingeleitet. Die Mischung wurde auf 5 l Wasser gegeben und abfiltriert. Der Farbstoff wurde im Vakuum getrocknet.

Man erhielt 240 g Farbstoff der Formel



5  $\lambda_{\text{max}}$  670 nm (NMP)

Analog wurden folgende Verbindungen hergestellt, in dem man die entsprechende molare Menge eines anderen Amins  $\text{L}^1$  bzw.  $\text{L}^2$  einsetzte:

Bei- spiele	$\text{L}^1$ und $\text{L}^2$	$\text{R}^3$	$\text{R}^4$	$\text{R}^5$	$\text{R}^6$	$\text{R}^7$	$\text{R}^8$	$\lambda_{\text{max}}$ nm (NMP)
17	3-Dimethyl- aminopropyl- amin	$\text{SO}_3\text{H}$	$(\text{SO}_2\text{N}-\text{H}-\text{R}^7)_3$	H	H	3-Dimethyl- aminopropyl	H	671
18	Methoxy- ethoxy- propylamin	$\text{Br}_2$	$\text{Cl}_4$	$\text{SO}_3\text{H}$	$(\text{SO}_2\text{N}-\text{R}^8\text{R}^7)_3$	Isobutyl	Isobutyl	679
19	3-Dimethyl- aminopropyl- amin	$(\text{SO}_2\text{NH}-\text{R}^7)_3$	H	H	H	3-Dimethyl- aminopropyl	H	672

10

### Beispiel 20

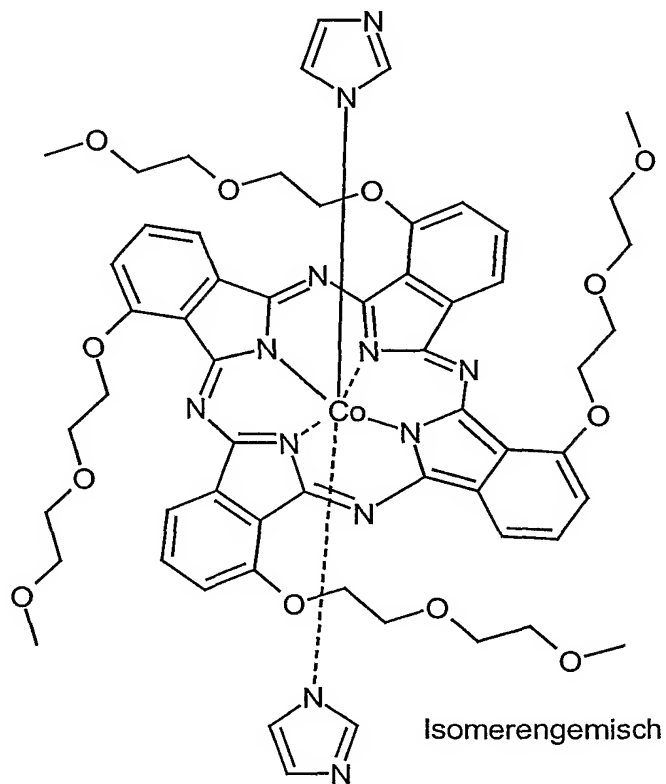
32 g 3-(Methoxyethoxyethoxy)phthalonitril und 385 ml 1-Butanol werden zum Sieden erhitzt und mit 21 g Lithium versetzt. Diese Mischung wird 1 h bei 120°C er-  
 15 hitzt. Nach dem Abkühlen wird 500 ml Wasser zugegeben und abgesaugt. Ausbeute 15 g Farbstoff.

## Einführung des Metalls:

15 g des grünen Farbstoffs werden in 200 ml DMF gegeben und mit 2 g  $\text{CoCl}_2$  versetzt. Die Mischung wird 2 h auf Rückfluss erhitzt. Nach dem Abkühlen wird mit  
5 200 ml Wasser versetzt und abgesaugt. Ausbeute 12 g Farbstoff.

## Einführung axialer Liganden:

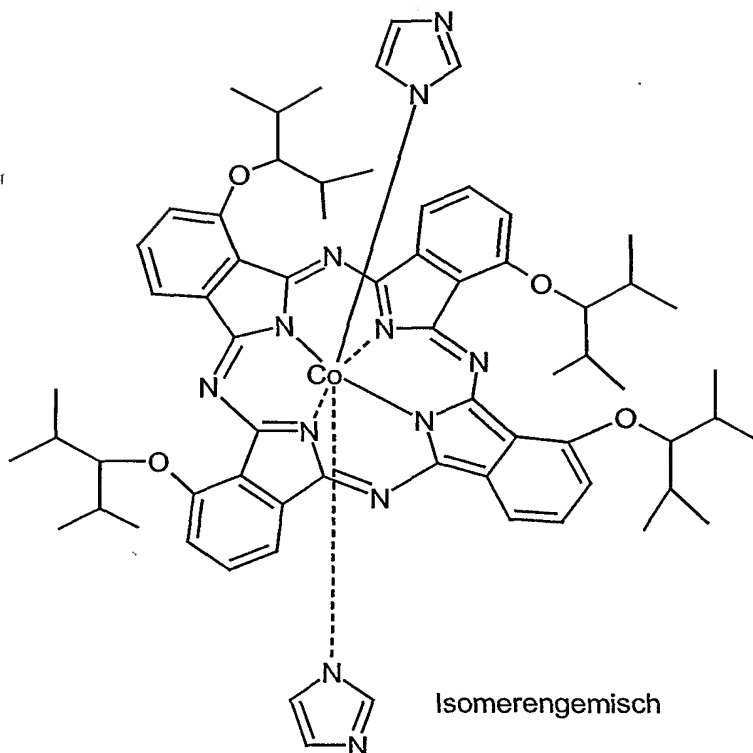
Eine Mischung von 12 g Farbstoff und 24 g Imidazol wird mit 200 ml DMF in einem  
10 offenen Becherglas 24 h gerührt. Es wird 250 ml Wasser zugegeben und abgesaugt. Der Farbstoff wurde im Vakuum getrocknet. Man erhielt 11 g Farbstoff der Formel



$\lambda_{\text{max}}$  715 nm (NMP)

15

Analog wurde folgende Verbindung hergestellt:

**Beispiel 21**

$\lambda_{\text{max}}$  718 nm (NMP)

5

**Beispiel 22**

Es wurde bei Raumtemperatur eine 2 %ige Lösung einer Farbstoffmischung aus gleichen Gewichtsteilen des CoPc-Komplexes aus Beispiel 5 und der Verbindung der Formel IIa in 2,2,3,3-Tetrafluorpropanol hergestellt. Diese Lösung wurde mittels Spin Coating auf ein pregrooved Polycarbonat Substrat appliziert. Das pregrooved Polycarbonat wurde mittels Spritzguß als Disk hergestellt. Die Dimensionen der Disk und der Groovestruktur entsprachen denen, die üblicherweise für CD-R verwendet werden. Die Disk mit der Farbstoffschicht als Informationsträger wurde mit 100 nm Ag bedampft. Anschließend wurde ein UV-härtbarer Acryllack durch Spin Coating appliziert und mittels einer UV-Lampe ausgehärtet. Mit einem kommerziellen Testschreiber für CD-R (Pulstec® OMT 2000 x 4) wurde z.B. bei 12 mW Schreibleistung

10

15

und einfacher Schreibgeschwindigkeit (1,4 m/s) beim Auslesen der Information eine Modulationshöhe von 38 % (30 % bis 70 % ist CD-R Spezifikation) für das 3T Signal und 62% (> 60 % ist CD-R Spezifikation) für das 11T Signal erhalten.

#### 5      **Beispiel 23**

Es wurde bei Raumtemperatur eine 2 % Lösung einer Farbstoffmischung aus gleichen Gewichtsteilen des CoPc-Komplexes aus Beispiel 4 und der Verbindung der Formel IIa in 2,2,3,3-Tetrafluorpropanol hergestellt. Diese Lösung wurde mittels  
10 Spin Coating appliziert. Mit einem kommerziellen Testschreiber für CD-R (Pulstec® OMT 2000 x 4) wurde z.B. bei 14 mW Schreibleistung und zweifacher Schreibgeschwindigkeit (2,8 m/s) beim Auslesen der Information eine Modulationshöhe von 32 % (30 % bis 70 % ist CD-R Spezifikation) für das 3T Signal und 68 % (> 60 % ist CD-R Spezifikation) für das 11T Signal erhalten.

15

#### **Beispiel 24**

Es wurde bei Raumtemperatur eine 32 % Lösung einer Farbstoffmischung aus gleichen Gewichtsteilen Phthalogenblau des Co-Pc-Komplexes aus Beispiel 4 und der  
20 Verbindung der Formel IIa in 10 %iger Essigsäure hergestellt. Diese Stammlösung wurde mit Diacetonalkohol auf 8 % Farbstoffanteil verdünnt. Diese Lösung wurde mittels Spin Coating analog Beispiel 22 auf das Substrat aufgetragen und das Substrat analog Bsp. 20 mit einer Reflexions- und Schutzschicht versehen. In Abänderung zu Beispiel 20 wurden jedoch lediglich 50 nm Ag als Reflexionsschicht aufgetragen.  
25 Mit einem kommerziellen Testschreiber für CD-R (Pulstec OMT 2000 x 4) wurde z.B. bei 8 mW Schreibleistung und einfacher Schreibgeschwindigkeit (1,4 m/s) beim Auslesen der Information eine Modulationshöhe von 32 % (30 % bis 70 % ist CD-R Spezifikation) für das 3T Signal und 67 % (> 60% ist CD-R Spezifikation) für das 11T Signal erhalten.

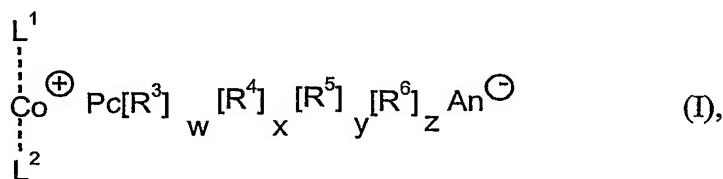
30

**Beispiel 25**

Es wurde bei Raumtemperatur eine 2% Lösung des Co-Phthalocyanin Komplexes aus Beispiel 1 in 2,2,3,3-Tetrafluorpropanol hergestellt. Diese Lösung wurde mittels  
5 Spin Coating analog Beispiel 22 auf das Substrat aufgetragen und das Substrat analog Beispiel 20 mit einer Reflexions- und Schutzschicht versehen. In Abänderung zu Beispiel 20 wurden jedoch lediglich 50 nm Ag als Reflexionsschicht aufgetragen. Mit einem kommerziellen Testschreiber für CD-R (Pulstec OMT 2000 x 4) wurde z.B. bei 12 mW Schreibleistung und einfacher Schreibgeschwindigkeit (1.4 m/s)  
10 beim Auslesen der Information eine Modulationshöhe von 34% (30% bis 70% ist CD-R Spezifikation) für das 3T Signal und 62% (> 60% ist CD-R Spezifikation) für das 11T Signal erhalten.

**Patentansprüche**

1. Optischer Datenträger enthaltend ein transparentes Substrat auf dessen Oberfläche eine mit Licht beschreibbare Informationsschicht und gegebenenfalls eine Reflektionsschicht, gegebenenfalls Zwischenschichten und/oder gegebenenfalls eine Schutzschicht aufgebracht ist, dadurch gekennzeichnet, dass die mit Licht beschreibbare Informationsschicht wenigstens einen Co-Phthalocyaninfarbstoff der allgemeinen Formel I enthält



worin

CoPc für Kobalt-(III)-Phthalocyanin steht, wobei  $L^1$  und  $L^2$  axiale, koordinativ gebundene Liganden des Kobalt-Zentralatoms sind und die Reste  $R^3$  bis  $R^6$  Substituenten des Phthalocyanins entsprechen, worin

$L^1$  und  $L^2$  jeweils unabhängig voneinander für ein Amin der Formel  $NR^0R^1R^2$  oder für ein Isonitril der Formel  $IC \equiv N^{\ominus} - R^{\oplus}$  stehen, worin

$R^0$ ,  $R^1$  und  $R^2$  unabhängig voneinander für Wasserstoff, Alkyl, Cycloalkyl, Alkenyl, Aryl oder Hetaryl stehen oder zwei der Reste  $R^0$  bis  $R^2$  zusammen mit dem N-Atom, an das sie gebunden sind einen hydrierten, teilhydrierten, quasiaromatischen oder aromatischen Ring bilden, vorzugsweise einen 5- bis 7-gliedrigen Ring bilden, der gegebenenfalls weitere Heteroatome, insbesondere aus der Gruppe N, O und/oder S enthält,

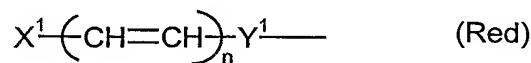


R für Alkyl, Cycloalkyl, Alkenyl, Aryl oder Hetaryl steht,

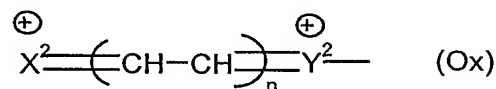
$R^3$ ,  $R^4$ ,  $R^5$  und  $R^6$  unabhängig voneinander für Halogen, Cyano, Alkyl, Aryl, Alkylamino, Dialkylamino, Alkoxy, Aryloxy, Arylthio, Alkylthio,  $SO_3H$ ,  $SO_2NR^7R^8$ ,  $CO_2R^{12}$ ,  $CONR^7R^8$ ,  $NH-COR^{12}$  oder einen Rest  $-(B)_m-D$  stehen,

B ein Brückenglied aus der Gruppe direkte Bindung,  $CH_2$ ,  $CO$ ,  $CH(Alkyl)$ ,  $C(Alkyl)_2$ ,  $NH$ ,  $S$ ,  $O$  oder  $-CH=CH-$  bedeutet, wobei  $(B)_m$  eine chemisch sinnvolle Kombination von Brückengliedern B bedeutet und m für 1 bis 10 steht, vorzugsweise ist  $m = 1$ ,

D für den monovalenten Rest eines Redoxsystems der Formel



oder



oder für einen Metallocenylrest oder Metallocenylcarbonylrest steht, wobei als Metallzentrum Titan, Mangan, Eisen, Ruthenium oder Osmium in Frage kommt,

$X^1$  und  $X^2$  unabhängig voneinander für  $NR'R''$ ,  $OR''$  oder  $SR''$  stehen,

$Y^1$  für  $NR'$ ,  $O$  oder  $S$  steht,

$Y^2$  für  $NR'$  steht,

n für 1 bis 10 steht und

R' und R" unabhängig voneinander für Wasserstoff, Alkyl, Cycloalkyl, Aryl oder Hetaryl stehen oder eine direkte Bindung oder eine Brücke zu einem der C-Atome der  $\text{---}(\text{CH}=\text{CH})_n\text{---}$  bzw.  $\text{=}\overline{(\text{CH}-\text{CH})}_n\text{=}$  Kette bilden,

5

w, x, y und z unabhängig voneinander für 0 bis 12 stehen und  $w+x+y+z \leq 12$  sind,

10

R<sup>7</sup> und R<sup>8</sup> unabhängig voneinander für Alkylamino, Hydroxyalkylamin, Dialkylamino, Bishydroxyalkylamino, Arylamino oder R<sup>7</sup> und R<sup>8</sup> gemeinsam mit dem N-Atom, an das sie gebunden sind, einen heterocyclischen 5-, 6- oder 7-gliedrigen Ring bilden, gegebenenfalls unter Beteiligung weiterer Heteroatome, insbesondere aus der Gruppe O, N und S, wobei NR<sup>7</sup>R<sup>8</sup> insbesondere für Pyrrolidino, Piperidino oder Morpholino steht, und

15

R<sup>12</sup> für Alkyl, Aryl, Hetaryl oder Wasserstoff steht,

An<sup>-</sup> für ein Anion steht.

20

2. Optischer Datenträger gemäß Anspruch 1, dadurch gekennzeichnet, dass in der mit Licht beschreibbaren Informationsschicht wenigstens ein Co-Phthalocyanin-Komplex der Formel I enthalten ist, worin für die Reste R<sup>0</sup> bis R<sup>8</sup>, R, R', R", R<sup>12</sup> sowie für die Liganden L<sup>1</sup> und L<sup>2</sup>:

25

Substituenten mit der Bezeichnung „Alkyl“ C<sub>1</sub>-C<sub>16</sub>-Alkyl, insbesondere C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>-Alkyl bedeuten, die gegebenenfalls durch Halogen, wie Chlor, Brom, Fluor, Hydroxy, Cyano und/oder C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>-Alkoxy substituiert sind,

die Substituenten mit der Bezeichnung „Alkoxy“ C<sub>1</sub>-C<sub>16</sub>-Alkoxy, insbesondere C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>-Alkoxy bedeuten, die gegebenenfalls durch Halogen, wie Chlor, Brom, Fluor, Hydroxy, Cyano und/oder C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>-Alkyl substituiert sind,

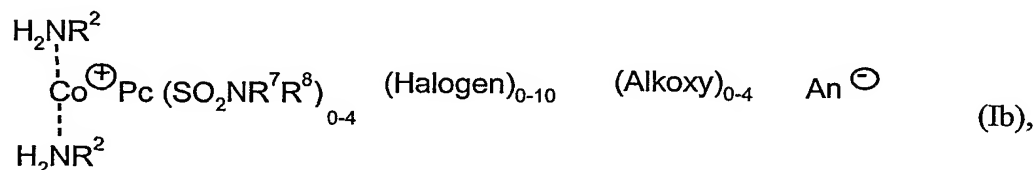
5        Substituenten mit der Bezeichnung „Cycloalkyl“ vorzugsweise C<sub>4</sub>-C<sub>8</sub>-Cycloalkyl, insbesondere C<sub>5</sub> bis C<sub>6</sub>-Cycloalkyl bedeuten, die gegebenenfalls durch Halogen, wie Chlor, Brom oder Fluor, Hydroxy, Cyano und/oder C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>-Alkyl substituiert sind,

10       Substituenten mit der Bezeichnung „Alkenyl“ vorzugsweise C<sub>6</sub>-C<sub>8</sub>-Alkenyl bedeuten, die gegebenenfalls durch Halogen, wie Chlor, Brom oder Fluor, Hydroxy, Cyano und/oder C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>-Alkyl substituiert sind, insbesondere bedeutet Alkenyl Allyl,

15       Substituenten mit der Bedeutung „Hetaryl“ vorzugsweise für heterocyclische Reste mit 5- bis 7-gliedrigen Ringen, die vorzugsweise Heteroatome aus der Gruppe N, S und/oder O enthalten und gegebenenfalls mit aromatischen Ringen anelliert sind oder gegebenenfalls weitere Substituenten tragen  
beispielsweise Halogen, Hydroxy, Cyano und/oder Alkyl, wobei besonders  
20       bevorzugt sind: Pyridyl, Furyl, Thienyl, Oxazolyl, Thiazolyl, Imidazolyl, Chinolyl, Benzoxazolyl, Benzthiazolyl und Benzimidazolyl,

die Substituenten mit der Bezeichnung „Aryl“ C<sub>6</sub>-C<sub>10</sub>-Aryl, vorzugsweise Phenyl oder Naphthyl bedeuten, die gegebenenfalls durch Halogen, wie F, Cl,  
25       Hydroxy, C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>-Alkyl, C<sub>1</sub>-C<sub>6</sub>-Alkoxy, NO<sub>2</sub> und/oder CN substituiert sind.

3. Optische Datenträger gemäß Anspruch 1, dadurch gekennzeichnet, dass der CoPc-Komplex der Formel I dem der Formel Ib entspricht



5

worin die Substituenten die Bedeutung gemäß Anspruch 1 haben.

4. Optische Datenträger gemäß Anspruch 1, dadurch gekennzeichnet, dass in der mit Licht beschreibbaren Informationsschicht wenigstens ein Co-Phthalocyanin-Komplex der Formel I enthalten ist, worin

10

$L^1$  und  $L^2$  unabhängig voneinander für Ammoniak, Methylamin, Ethylamin, Ethanolamin, Propylamin, Isopropylamin, Butylamin, Isobutylamin, tert.-Butylamin, Pentylamin, tert.-Amylamin, Benzylamin, Methylphenylhexylamin, Aminopropylamin, Aminoethylamin, 3-Dimethylaminopropylamin, 3-Diethylaminopropylamin, Diethylaminoethylamin, Dibutylaminpropylamin, Morpholinopropylamin, Piperidinopropylamin, Pyrrolidinopropylamin, Pyrrolidonopropylamin, 3-(Methyl-Hydroxyethylamino)propylamin, Methoxyethylamin, Ethoxyethylamin, Methoxypropylamin, Ethoxypropylamin, Methoxyethoxypropylamin, 3-(2-Ethylhexyloxy)propylamin, Isopropoxyisopropylamin, Dimethylamin, Diethylamin, Dipropylamin, Diisopropylamin, Diisobutylamin, Di-tert. Butylamin, Dipentylamin, Di-tert. Amylamin, Bis(2-Ethylhexyl)amin, Bis(aminopropyl)amin, Bis(aminoethyl)amin, Bis(3-dimethylaminopropyl)amin, Bis(3-Diethylaminopropyl)amin, Bis(diethylaminoethyl)amin, Bis(dibutylaminpropyl)amin, Di(morpholinopropyl)amin, Di(piperidinopropyl)amin, Di(pyrrolidinopropyl)amin, Di(pyrrolidonopropyl)amin, Bis(3-(Methyl-Hydroxyethylamino)propyl)amin, Dimethoxyethylamin, Diethoxy-

15

20

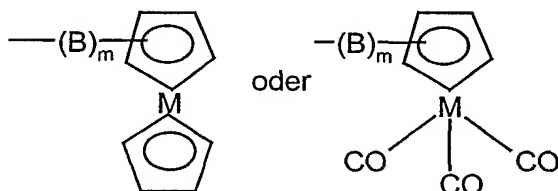
25

- ethylamin, Dimethoxypropylamin, Diethoxypropylamin, Di(methoxyethoxyethyl)amin, Di(methoxyethoxypropyl)amin, Bis(3-(2-Ethylhexyloxy)propyl)amin, Di(isopropoxyisopropyl)amin, Tripropylamin, Tri(methoxyethoxyethyl)amin, Tri(methoxyethoxypropyl)amin,
- 5 Diethylaminoethylpiperazin, Dipropylaminoethylpiperazin, Morphin, Piperidin, Piperazin, Pyridylamin, 2-Thiazolylamin, 2-Benzthiazolylamin, 2-Benzoxazolylamin, 3-Iminoisoindoleninylamin, Pyridin, Propylpyridin, Butylpyridin, 2,2-Bipyridin, 4,4-Bipyridin, Pyridazin, Pyrimidin, Pyrazin, Imidazol, Benzimidazol, Isoxazol, Benzisoxazol,
- 10 Oxazol, Benzoxazol, Thiazol, Benzthiazol, Chinolin, Pyrrol, Indol, 3,3-Dimethylindol, Aminopyridino, Anilino, p-Toluidin, p-tert. Butylanilino, p-Anisidin, Isopropylanilino, Butoxyanilino oder Naphthylamino stehen, oder
- 15 L<sup>1</sup> und L<sup>2</sup> unabhängig voneinander für Methylisonitril, Ethylisonitril, Ethanolisonitril, Propylisonitril, Isopropylisonitril, Butylisonitril, Isobutylisonitril, tert. Butylisonitril, Pentylisonitril, tert-Amylisonitril, Benzylisonitril, Methylphenylhexylisonitril, Aminopropylisonitril, Aminoethylisonitril, 3-Dimethylaminopropylisonitril, 3-Diethylaminopropylisonitril, Diethylaminoethylisonitril, Dibutylaminpropylisonitril, Morpholinopropylisonitril, Piperidinopropylisonitril, Pyrrolidinopropylisonitril, Pyrrolidonopropylisonitril, 3-(Methyl-hydroxyethylamino)propylisonitril, Methoxyethylisonitril, Ethoxyethylisonitril, Methoxypropylisonitril, Ethoxypropylisonitril, Methoxyethoxypropylisonitril, 3-(2-Ethylhexyloxy)propylisonitril, Isopropoxyisopropylisonitril, Dimethylisonitril, Diethylisonitril, Diethanolisonitril,
- 20 Dipropylisonitril, Diisopropylisonitril, Dibutylisonitril, Diisobutylisonitril, Di-tert.-butylisonitril, Dipentylisonitril, Di-tert.-amylisonitril, Bis(2-Ethylhexyl)isonitril, Bis(aminoethyl)isonitril, Bis(aminopropyl)isonitril, Bis(dimethylaminopropyl)isonitril, Bis(diethylaminopropyl)isonitril, Bis(diethylaminoethyl)isonitril, Bis(dibutylaminopro-
- 25 30

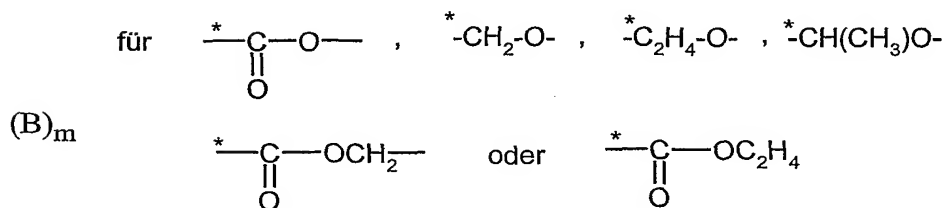
5                   pyl)isonitril, Di(morpholinopropyl)isonitril, Di(piperidinopropyl) iso-  
                   nitril, Di(pyrrolidinopropyl)isonitril, Di(pyrrolidonopropyl)isonitril,  
                   Bis(3-(Methyl-hydroxyethylamino)propyl)isonitril, Dimethoxyethyl-  
                   isonitril, Diethoxyethylisonitril, Dimethoxypropylisonitril, Diethoxy-  
 10                  propylisonitril, Di(methoxyethoxyethyl)isonitril, Di(methoxyethoxy-  
                   propyl)isonitril, Bis(3-(2-Ethylhexyloxy)propyl)isonitril, Di(isopro-  
                   pyloxyisopropyl)isonitril, Tripropylisonitril, Tri(methoxyethoxy-  
                   ethyl)isonitril, Tri(methoxyethoxypropyl)isonitril, Pyridylisonitril, 2-  
                   Thiazolylisonitril, 2-Benzthiazolylisonitril, 2-Benzoxazolylisonitril, 3-  
 15                  Iminoisoindoleninylisonitril, Phenylisonitril, p-tert.-Butylphenyliso-  
                   nitril, p-Methoxyphenylisonitril, Isopropylphenylisonitril, Butoxyphe-  
                   nylisonitril oder Naphtylisonitril stehen,

15                   $R^3$ ,  $R^4$ ,  $R^5$  und  $R^6$  unabhängig voneinander für Chlor, Fluor, Brom, Iod,  
                   Cyano, Methyl, Ethyl, Propyl, Isopropyl, Butyl, Isobutyl, tert. Butyl,  
                   Pentyl, tert. Amyl, Hydroxyethyl, 3-Dimethylaminopropyl, 3-Diethyl-  
                   aminopropyl, Phenyl, p-tert.-Butylphenyl, p-Methoxyphenyl, Isopro-  
                   pylphenyl, Trifluormethylphenyl, Naphthyl, Methylamino, Ethyl-  
                   amino, Propylamino, Isopropylamino, Butylamino, Isobutylamino,  
 20                  tert. Butylamino, Pentylamino, tert. Amylamino, Benzylamino,  
                   Methylphenylhexylamino, Hydroxyethylamino, Aminopropylamino,  
                   Aminoethylamino, 3-Dimethylaminopropylamino, 3-Diethylamino-  
                   propylamino, Diethylaminoethylamino, Dibutylaminopropylamino,  
                   Morpholinopropylamino, Piperidinopropylamino, Pyrrolidinopropyl-  
 25                  amino, Pyrrolidonopropylamino, 3-(Methyl-Hydroxyethylamino)pro-  
                   pylamino, Methoxyethylamino, Ethoxyethylamino, Methoxypropyl-  
                   amino, Ethoxypropylamino, Methoxyethoxypropylamino, 3-(2-Ethyl-  
                   hexyloxy)propylamino, Isopropyloxypropylamino, Dimethylamino,  
                   Diethylamino, Diethanolamino, Dipropylamino, Diisopropylamino,  
 30                  Dibutylamino, Diisobutylamino, Di-tert. butylamino, Dipentylamino,  
                   Di-tert. amylamino, Bis(2-Ethylhexyl)amino, Bis(aminopropyl)amino,

Bis(aminoethyl)amino, Bis(3-Dimethylaminopropyl)amino, Bis(3-diethylaminopropyl)amino, Bis(diethylaminoethyl)amino, Bis(dibutylaminopropyl)amino, Di(morpholinopropyl)amino, Di(piperidinopropyl)amino, Di(pyrrolidinopropyl)amino, Di(pyrrolidonopropyl)amino,  
 5 Bis(3-(methyl-hydroxyethylamino)propyl)amino, Dimethoxyethylamino, Diethoxyethylamino, Dimethoxypropylamino, Diethoxypropylamino, Di(methoxyethoxyethyl)amino, Di(methoxyethoxypropyl)amino, Bis(3-(2-Ethylhexyloxy)propyl)amino, Di(isopropoxyisopropyl)amino, Methoxy, Ethoxy, Propyloxy, Isopropoxy, Butyloxy,  
 10 Isobutyloxy, tert.- Butyloxy, Pentyloxy, tert. Amyloxy, Methoxyethoxy, Ethoxyethoxy, Methoxypropyloxy, Ethoxypropyloxy, Methoxyethoxypropyloxy, 3-(2-Ethylhexyloxy)propyloxy, Phenyl, Methylthio, Ethylthio, Propylthio, Isopropylthio, Butylthio, Isobutylthio, tert.-Butylthio, Pentythio, tert.-Amylthio, Methoxyphenyl, Tri-  
 15 fluormethylphenyl, Naphthyl,  $\text{CO}_2\text{R}^{12}$ ,  $\text{CONR}^7\text{R}^8$ ,  $\text{NH-COR}^{12}$ ,  $\text{SO}_3\text{H}$ ,  $\text{SO}_2\text{NR}^7\text{R}^8$  oder für einen Rest der Formel



20 worin



wobei der Stern (\*), die Anknüpfung mit dem 5-Ring anzeigt,

w, x, y und z unabhängig voneinander für 0 bis 8 stehen und  $w+x+y+z \leq 12$  sind,

5  $An^-$  für Chlorid, Bromid, Fluorid,  $C_1$ - bis  $C_{20}$ -Alkyl $COO^-$ , Formiat, Oxalat, Lactat, Glycolat, Citrat,  $CH_3OSO_3^-$ ,  $NH_2SO_3^-$ ,  $CH_3SO_3^-$ ,  $\frac{1}{2} SO_4^{2-}$  oder  $\frac{1}{3} PO_4^{3-}$  steht,

10  $NR^7R^8$  für Amino, Methylamino, Ethylamino, Propylamino, Isopropylamino, Butylamino, Isobutylamino, tert. Butylamino, Pentylamino, tert. Amylamino, Benzylamino, Methylphenylhexylamino, 2-Ethyl-1-hexylamino, Hydroxyethylamino, Aminopropylamino, Aminoethylamino, 3-Dimethylaminopropylamino, 3-Diethylaminopropylamino, Morpholinopropylamino, Piperidinopropylamino, Pyrrolidinopropylamino, Pyrrolidonopropylamino, 3-(Methyl-Hydroxyethylamino)propylamino, Methoxyethylamino, Ethoxyethylamino, Methoxypropylamino, Ethoxypropylamino, Methoxyethoxypropylamino, 3-(2-Ethylhexyloxy)propylamino, Isopropoxyisopropylamino, Dimethylamino, Diethylamino, Dipropylamino, Diisopropylamino, Dibutylamino, Diisobutylamino, Di-tert. butylamino, Dipentylamino, Di-tert. amyloamino, Bis(2-Ethylhexyl)amino, Dihydroxyethylamino, Bis(aminoethyl)amino, Bis(3-dimethylaminopropyl)amino, Bis(3-diethylaminopropyl)amino, Di(morpholinopropyl)amino, Di(piperidinopropyl)amino, Di(pyrrolidinopropyl)amino, Di(pyrrolidonopropyl)amino, Bis(3-(Methyl-Hydroxyethylamino)propyl)amino, Dimethoxyethylamino, Diethoxyethylamino, Dimethoxypropylamino, Diethoxypropylamino, Di(methoxyethoxypropyl)amino, Bis(3-(2-Ethylhexyloxy)propyl)amino, Di(isopropoxyisopropyl)amino, Anilino, p-Toluidino, p-tert. Butylanilino, p-Anisidino, Isopropylanilino, Naphthylamino stehen oder  $NR^7R^8$  stehen, insbesondere für Pyrrolidino, Piperidino, Piperazino oder Morpholino stehen,

20

25

30



5 R<sup>12</sup> für Wasserstoff, Methyl, Ethyl, Propyl, Isopropyl, Butyl, Isobutyl, tert.-Butyl, Pentyl, tert.-Amyl, Phenyl, p-tert.-Butylphenyl, p-Methoxyphenyl, Isopropylphenyl, p-Trifluormethylphenyl, Cyano-phenyl, Naphthyl, 4-Pyridinyl, 2-Pyridinyl, 2-Chinolinyl, 2-Pyrrolyl oder 2-Indolyl steht,

wobei

10 die Alkyl-, Alkoxy-, Aryl- und heterocyclischen Reste gegebenenfalls weitere Reste wie Alkyl, Halogen, Hydroxy, Hydroxyalkyl, Amino, Alkylamino, Dialkylamino, Nitro, Cyano, CO-NH<sub>2</sub>, Alkoxy, Alkoxy-carbonyl, Morpholino, Piperidino, Pyrrolidino, Pyrrolidono, Trialkylsilyl, Trialkylsiloxo oder Phenyl tragen können, die Alkyl- und/oder Alkoxyreste gesättigt, ungesättigt, gerad-  
15 kettig oder verzweigt sein können, die Alkylreste teil- oder perhalogeniert sein können, die Alkyl- und/oder Alkoxyreste ethoxyliert oder propoxyliert oder silyliert sein können, benachbarte Alkyl und/oder Alkoxyreste an Aryl- oder heterocyclischen Resten gemeinsam eine drei- oder viergliedrige Brücke ausbilden können.

20

5. Optische Datenträger gemäß Anspruch 1, dadurch gekennzeichnet, dass die mit Licht beschreibbare Informationsschicht zusätzlich ein von (I) verschiedenes metallhaltiges oder metallfreies Phthalocyanin enthält, wobei das Zentralatom ausgewählt wird aus den Gruppen: Si, Zn, Al, Cu, Pd, Pt, AU  
25 und Ag, insbesondere Cu oder Pd.

25

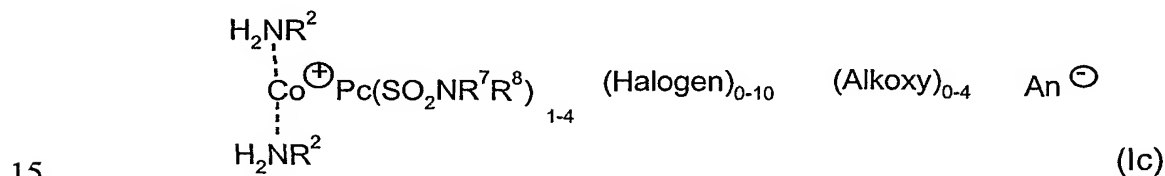
6. Optische Datenträger mit einer beschriebenen Informationsschicht, erhältlich dadurch, dass der optische Datenträger gemäß Anspruch 1 mit Licht einer Wellenlänge von 700 bis 830 nm beschrieben wurde.

30

7. Verfahren zur Herstellung der optischen Datenträger gemäß Anspruch 1, dadurch gekennzeichnet, dass man auf ein transparentes Substat die mit Licht beschreibbare Informationsschicht durch Beschichten mit dem Co-Phthalocyanin-Komplex der Formel I, gegebenenfalls in Kombination mit geeigneten Bindern, Additiven und geeigneten Lösungsmitteln, aufbringt und gegebenenfalls weiter mit einer Reflexionsschicht, gegebenenfalls weiteren Zwischenschichten und gegebenenfalls einer Schutzschicht versieht.

8. Verwendung von Co-Phthalocyanin-Komplexen der Formel (I) als lichtabsorbierende Verbindungen in der mit Licht beschreibbaren Informationsschicht von optischen Datenspeichern.

9. Verbindungen der Formel Ic



worin

Halogen für Chlor, Brom oder Fluor steht,

$\text{R}^7$  und  $\text{R}^8$  unabhängig voneinander die Bedeutung gemäß  $\text{R}^7$  und  $\text{R}^8$  in Anspruch 1 besitzen,

Alkoxy für  $\text{C}_1$ - $\text{C}_6$ -Alkoxy steht, das gegebenenfalls substituiert ist und  $\text{Co}^{\oplus}\text{Pc}$ ,  $\text{An}^{\ominus}$ ,  $\text{L}^1$  und  $\text{L}^2$  die in Anspruch 1 angegebene Bedeutung besitzen.

10. Verfahren zur Herstellung der Verbindung gemäß Anspruch 9, dadurch gekennzeichnet, dass man ein mit Sulfonamidgruppen der Formel  $\text{SO}_2\text{NR}^7\text{R}^8$

substituiertes, wobei  $R^7$  und  $R^8$  die oben genannte Bedeutung haben, und gegebenenfalls Halogen- und/oder Alkoxy-substituiertes Co-Phthalocyanin oxidiert und mit Aminen  $L^1$  und  $L^2$  umgesetzt.

## INTERNATIONAL SEARCH REPORT

Inter I Application No

PCT/EP 01/10427

## A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER

IPC 7 G11B7/24 C09B47/04 C09B47/08 C09B47/26 C01G51/00

According to International Patent Classification (IPC) or to both national classification and IPC

## B. FIELDS SEARCHED

Minimum documentation searched (classification system followed by classification symbols)

IPC 7 G11B C09B C07D C01G

Documentation searched other than minimum documentation to the extent that such documents are included in the fields searched

Electronic data base consulted during the international search (name of data base and, where practical, search terms used)

EPO-Internal

## C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category *	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
A	US 5 820 962 A (OGAWA TADASHI ET AL) 13 October 1998 (1998-10-13) column 1, line 5 -column 6, line 8 ---	1-8
A	EP 0 519 395 A (EASTMAN KODAK CO) 23 December 1992 (1992-12-23) cited in the application page 2, line 1 -page 3, line 57 --- -/--	1-8



Further documents are listed in the continuation of box C.



Patent family members are listed in annex.

## \* Special categories of cited documents :

- \*A\* document defining the general state of the art which is not considered to be of particular relevance
- \*E\* earlier document but published on or after the international filing date
- \*L\* document which may throw doubts on priority claim(s) or which is cited to establish the publication date of another citation or other special reason (as specified)
- \*O\* document referring to an oral disclosure, use, exhibition or other means
- \*P\* document published prior to the international filing date but later than the priority date claimed

- \*T\* later document published after the international filing date or priority date and not in conflict with the application but cited to understand the principle or theory underlying the invention
- \*X\* document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered novel or cannot be considered to involve an inventive step when the document is taken alone
- \*Y\* document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered to involve an inventive step when the document is combined with one or more other such documents, such combination being obvious to a person skilled in the art.
- \*Z\* document member of the same patent family

Date of the actual completion of the international search

4 December 2001

Date of mailing of the international search report

12/12/2001

Name and mailing address of the ISA

European Patent Office, P.B. 5818 Patentlaan 2  
NL - 2280 HV Rijswijk  
Tel. (+31-70) 340-2040, Tx. 31 651 epo nl,  
Fax: (+31-70) 340-3016

Authorized officer

Lindner, T

## INTERNATIONAL SEARCH REPORT

Inte 1al Application No

PCT/EP 01/10427

## C.(Continuation) DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category *	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
Y	YAHYA H K ET AL: "SYNTHESIS OF SOME COBALT PHTHALOCYANINE-3,3',3,3'-TETRASULPHONAMIDES AND SPECTROSCOPIC STUDIES OF THEIR APPLICATION TO CELLULOSIC FIBRES" JOURNAL OF THE SOCIETY OF DYERS AND COLOURISTS, SOCIETY OF DYERS AND COLOURISTS. BRADFORD, GB, vol. 104, no. 11, 1 November 1988 (1988-11-01), pages 432-434, XP000025874 ISSN: 0037-9859 * Section Experimental *	9,10
Y	US 2 756 119 A (FRITZ BAUMANN ET AL) 24 July 1956 (1956-07-24) claim 1; examples 1-5	9,10
Y	DE 15 69 753 A (FARBENFABRIKEN BAYER AG) 3 December 1970 (1970-12-03) page 1, line 1 -page 6, line 3 claims 1-9	9,10

# INTERNATIONAL SEARCH REPORT

Information on patent family members

International Application No

PCT/EP 01/10427

Patent document cited in search report		Publication date	Patent family member(s)	Publication date
US 5820962	A	13-10-1998	AU 1172797 A	17-07-1997
			CN 1169128 A , B	31-12-1997
			DE 69612189 D1	26-04-2001
			DE 69612189 T2	19-07-2001
			EP 0811506 A1	10-12-1997
			WO 9723354 A1	03-07-1997
EP 0519395	A	23-12-1992	US 5248538 A	28-09-1993
			CA 2070347 A1	19-12-1992
			DE 69223089 D1	18-12-1997
			DE 69223089 T2	10-06-1998
			EP 0519395 A1	23-12-1992
			JP 5185735 A	27-07-1993
US 2756119	A	24-07-1956	NONE	
DE 1569753	A	03-12-1970	BE 720210 A	03-02-1969
			CH 580675 A5	15-10-1976
			CH 514656 A	31-10-1971
			DE 1569753 A1	03-12-1970
			ES 357755 A1	16-03-1970
			FR 1580612 A	05-09-1969
			GB 1198954 A	15-07-1970
			NL 6812407 A	04-03-1969
			US 3636040 A	18-01-1972

# INTERNATIONALER RECHERCHENBERICHT

Internationales Aktenzeichen

PCT/EP 01/10427

## A. KLASSIFIZIERUNG DES ANMELDUNGSGEGENSTANDES

IPK 7 G11B7/24 C09B47/04 C09B47/08 C09B47/26 C01G51/00

Nach der Internationalen Patentklassifikation (IPK) oder nach der nationalen Klassifikation und der IPK

## B. RECHERCHIERTE GEBIETE

Recherchierter Mindestprüfstoff (Klassifikationssystem und Klassifikationssymbole)

IPK 7 G11B C09B C07D C01G

Recherchierte aber nicht zum Mindestprüfstoff gehörende Veröffentlichungen, soweit diese unter die recherchierten Gebiete fallen

Während der internationalen Recherche konsultierte elektronische Datenbank (Name der Datenbank und evtl. verwendete Suchbegriffe)

EPO-Internal

## C. ALS WESENTLICH ANGESEHENE UNTERLAGEN

Kategorie*	Bezeichnung der Veröffentlichung, soweit erforderlich unter Angabe der in Betracht kommenden Teile	Betr. Anspruch Nr.
A	US 5 820 962 A (OGAWA TADASHI ET AL) 13. Oktober 1998 (1998-10-13) Spalte 1, Zeile 5 -Spalte 6, Zeile 8 ---	1-8
A	EP 0 519 395 A (EASTMAN KODAK CO) 23. Dezember 1992 (1992-12-23) in der Anmeldung erwähnt Seite 2, Zeile 1 -Seite 3, Zeile 57 --- -/--	1-8

☒ Weitere Veröffentlichungen sind der Fortsetzung von Feld C zu entnehmen

☒ Siehe Anhang Patentfamilie

\* Besondere Kategorien von angegebenen Veröffentlichungen :

\*A\* Veröffentlichung, die den allgemeinen Stand der Technik definiert, aber nicht als besonders bedeutsam anzusehen ist

\*E\* älteres Dokument, das jedoch erst am oder nach dem internationalen Anmeldedatum veröffentlicht worden ist

\*L\* Veröffentlichung, die geeignet ist, einen Prioritätsanspruch zweifelhaft erscheinen zu lassen, oder durch die das Veröffentlichungsdatum einer anderen im Recherchenbericht genannten Veröffentlichung belegt werden soll oder die aus einem anderen besonderen Grund angegeben ist (wie ausgeführt)

\*O\* Veröffentlichung, die sich auf eine mündliche Offenbarung, eine Benutzung, eine Ausstellung oder andere Maßnahmen bezieht

\*P\* Veröffentlichung, die vor dem internationalen Anmeldedatum, aber nach dem beanspruchten Prioritätsdatum veröffentlicht worden ist

\*T\* Spätere Veröffentlichung, die nach dem internationalen Anmeldedatum oder dem Prioritätsdatum veröffentlicht worden ist und mit der Anmeldung nicht kollidiert, sondern nur zum Verständnis des der Erfindung zugrundeliegenden Prinzips oder der ihr zugrundeliegenden Theorie angegeben ist

\*X\* Veröffentlichung von besonderer Bedeutung; die beanspruchte Erfindung kann allein aufgrund dieser Veröffentlichung nicht als neu oder auf erfinderischer Tätigkeit beruhend betrachtet werden

\*Y\* Veröffentlichung von besonderer Bedeutung; die beanspruchte Erfindung kann nicht als auf erfinderischer Tätigkeit beruhend betrachtet werden, wenn die Veröffentlichung mit einer oder mehreren anderen Veröffentlichungen dieser Kategorie in Verbindung gebracht wird und diese Verbindung für einen Fachmann naheliegend ist

\*Z\* Veröffentlichung, die Mitglied derselben Patentfamilie ist

Datum des Abschlusses der internationalen Recherche

4. Dezember 2001

Absenddatum des internationalen Recherchenberichts

12/12/2001

Name und Postanschrift der Internationalen Recherchenbehörde

Europäisches Patentamt, P.B. 5818 Patentlaan 2  
NL - 2280 HV Rijswijk  
Tel. (+31-70) 340-2040, Tx. 31 651 epo nl,  
Fax: (+31-70) 340-3016

Bevollmächtigter Bediensteter

Lindner, T

## INTERNATIONALER RECHERCHENBERICHT

Internationales Aktenzeichen

PCT/EP 01/10427

C.(Fortsetzung) ALS WESENTLICH ANGESEHENE UNTERLAGEN		
Kategorie*	Bezeichnung der Veröffentlichung, soweit erforderlich unter Angabe der in Betracht kommenden Teile	Betr. Anspruch Nr.
Y	YAHYA H K ET AL: "SYNTHESIS OF SOME COBALT PHTHALOCYANINE-3,3',3,3'-TETRASULPHONAMIDES AND SPECTROSCOPIC STUDIES OF THEIR APPLICATION TO CELLULOSIC FIBRES" JOURNAL OF THE SOCIETY OF DYERS AND COLOURISTS, SOCIETY OF DYERS AND COLOURISTS. BRADFORD, GB, Bd. 104, Nr. 11, 1. November 1988 (1988-11-01), Seiten 432-434, XP000025874 ISSN: 0037-9859 * Section Experimental * ---	9,10
Y	US 2 756 119 A (FRITZ BAUMANN ET AL) 24. Juli 1956 (1956-07-24) Anspruch 1; Beispiele 1-5 ---	9,10
Y	DE 15 69 753 A (FARBENFABRIKEN BAYER AG) 3. Dezember 1970 (1970-12-03) Seite 1, Zeile 1 -Seite 6, Zeile 3 Ansprüche 1-9 -----	9,10



# INTERNATIONALER RECHERCHENBERICHT

Angaben zu Veröffentlichungen, die zur selben Patentfamilie gehören

Inte es Aktenzeichen

PCT/EP 01/10427

Im Recherchenbericht angeführtes Patentedokument	Datum der Veröffentlichung	Mitglied(er) der Patentfamilie	Datum der Veröffentlichung
US 5820962	A	13-10-1998	AU 1172797 A 17-07-1997
			CN 1169128 A ,B 31-12-1997
			DE 69612189 D1 26-04-2001
			DE 69612189 T2 19-07-2001
			EP 0811506 A1 10-12-1997
			WO 9723354 A1 03-07-1997
EP 0519395	A	23-12-1992	US 5248538 A 28-09-1993
			CA 2070347 A1 19-12-1992
			DE 69223089 D1 18-12-1997
			DE 69223089 T2 10-06-1998
			EP 0519395 A1 23-12-1992
			JP 5185735 A 27-07-1993
US 2756119	A	24-07-1956	KEINE
DE 1569753	A	03-12-1970	BE 720210 A 03-02-1969
			CH 580675 A5 15-10-1976
			CH 514656 A 31-10-1971
			DE 1569753 A1 03-12-1970
			ES 357755 A1 16-03-1970
			FR 1580612 A 05-09-1969
			GB 1198954 A 15-07-1970
			NL 6812407 A 04-03-1969
			US 3636040 A 18-01-1972

**DERWENT-ACC-NO:** 2002-454423**DERWENT-WEEK:** 200663*COPYRIGHT 2008 DERWENT INFORMATION LTD***TITLE:** New cobalt (III) phthalocyanine  
compounds are useful as light absorbing  
compounds for optical data storage**INVENTOR:** BERNETH H ; BIERINGER T ; BRUDER F ; BRUDER F  
K ; HAGEN R ; HASSENBUCK K ; HASSENBUCK K ;  
KOSTROMINE S ; OSER R ; STAWITZ J ; STAWITZ J  
W**PATENT-ASSIGNEE:** BAYER AG[FARB]**PRIORITY-DATA:** 2001DE-1024585 (May 21, 2001) , 2000DE-  
1046771 (September 21, 2000) , 2001DE-  
1015227 (March 28, 2001)**PATENT-FAMILY:**

<b>PUB-NO</b>	<b>PUB-DATE</b>	<b>LANGUAGE</b>
WO 0225205 A1	March 28, 2002	DE
DE 10124585 A1	May 2, 2002	DE
AU 200185943 A	April 2, 2002	EN
EP 1322906 A1	July 2, 2003	DE
CZ 200300832 A3	June 18, 2003	CS
KR 2003034197 A	May 1, 2003	KO
CN 1462358 A	December 17, 2003	ZH
JP 2004509377 W	March 25, 2004	JA
IN 200600023 P3	September 1, 2006	EN

**DESIGNATED-STATES :** AE AG AL AM AT AU AZ BA BB BG BR BY  
 BZ CA CH CN CO CR CU CZ DE DK DM DZ  
 EC EE ES FI GB GD GE GH GM HR HU ID  
 IL IN IS JP KE KG KP KR KZ LC LK LR  
 LS LT LU LV MA MD MG MK MN MW MX MZ  
 NO NZ PH PL PT RO RU SD SE SG S I SK  
 SL TJ TM TR TT TZ UA UG US UZ VN YU  
 ZA ZW AT BE CH CY DE DK EA ES FI FR  
 GB GH GM GR IE IT KE LS LU MC MW MZ  
 NL OA PT SD SE SL SZ TR TZ UG ZW AL  
 AT BE CH CY DE DK ES FI FR GB GR IE  
 IT LI LT LU LV MC MK NL PT RO SE SI  
 TR

**APPLICATION-DATA:**

<b>PUB-NO</b>	<b>APPL- DESCRIPTOR</b>	<b>APPL-NO</b>	<b>APPL-DATE</b>
WO2002025205A1	N/A	2001WO- EP10427	September 10, 2001
DE 10124585A1	N/A	2001DE- 1024585	May 21, 2001
AU 200185943A	N/A	2001AU- 085943	September 10, 2001
CN 1462358A	N/A	2001CN- 816124	September 10, 2001
EP 1322906A1	N/A	2001EP- 965272	September 10, 2001
EP 1322906A1	N/A	2001WO- EP10427	September 10, 2001
CZ 200300832A3	N/A	2001WO- EP10427	September 10, 2001
JP2004509377W	N/A	2001WO- EP10427	September 10, 2001
IN 200600023P3	N/A	2001WO- EP10427	September 10, 2001
JP2004509377W	N/A	2002JP- 528765	September 10, 2001

CZ 200300832A3	N/A	2003CZ- 000832	September 10, 2001
KR2003034197A	N/A	2003KR- 704032	March 20, 2003
IN 200600023P3	Based on	2006IN- MN00023	January 5, 2006

**INT-CL-CURRENT :**

<b>TYPE</b>	<b>IPC DATE</b>
CIPP	G03C1/67 20060101
CIPS	C07D217/14 20060101
CIPS	C07D221/04 20060101
CIPS	C07D311/12 20060101
CIPS	C07D311/80 20060101
CIPS	C07D455/04 20060101
CIPS	C07D491/04 20060101
CIPS	C07F15/06 20060101
CIPS	C09B23/01 20060101
CIPS	C09B23/04 20060101
CIPS	C09B23/10 20060101
CIPS	C09B29/00 20060101
CIPS	C09B29/036 20060101
CIPS	C09B29/36 20060101
CIPS	C09B44/10 20060101
CIPS	C09B47/04 20060101
CIPS	C09B47/08 20060101
CIPS	C09B47/26 20060101
CIPS	C09K9/02 20060101
CIPS	G03C1/76 20060101
CIPS	G11B7/0045 20060101
CIPS	G11B7/24 20060101
CIPS	G11B7/244 20060101

CIPS	G11B7/247	20060101
CIPS	G11B7/248	20060101
CIPS	G11B7/249	20060101
CIPS	G11B7/254	20060101
CIPS	G11B7/26	20060101

**RELATED-ACC-NO:** 2002-443989 2002-723712 2002-723713  
2002-750654 2002-759972 2003-029981  
2003-047022 2003-075580 2003-092862  
2003-103287 2003-103420 2003-103421  
2003-239071 2003-239072 2003-278721  
2003-403037 2003-865063

**ABSTRACTED-PUB-NO:** WO 0225205 A1

**BASIC-ABSTRACT:**

NOVELTY - New cobalt (III) phthalocyanine compounds are claimed.

DESCRIPTION - Cobalt (III) phthalocyanine compounds of formula (1) are new.

Halogen = chlorine, bromine or fluorine;

R7, R8 = alkylamino, hydroxyalkylamino-, dialkylamino, bis hydroxyalkylamino, arylamino or R7 and R8 together with the N atom they are bonded to form a 5-7 membered ring, optionally containing other hetero atoms, preferably O, N and S whereby NR7R8 is preferably pyrrolidine, piperidine or morpholine;

alkoxy = 1-6C alkoxy, optionally substituted;

Co+Pc = cobalt (III) phthalocyanine;

L1, L2 = an amine, NR0R1R2 or isonitrile of formula (2);

R0-R2 = H, alkyl, cycloalkyl, alkenyl, aryl or heteroaryl or two of R0-R2 together with the N atom they are bonded to form an at least partially hydrogenated, quasiaromatic or aromatic ring, preferably 5-7 membered, optionally containing other hetero atoms, preferably N, O and/or S;

An- = anion.

INDEPENDENT CLAIMS are included for:

(1) process for the production of compounds of formula (1) by oxidation of a cobalt-phthalocyanine, substituted with SO<sub>2</sub>NR<sub>7</sub>R<sub>8</sub> and optionally halogen and/or alkoxy, and reaction with amines L1 and L2;

(2) optical data carrier comprising a transparent substrate having light-write-able information layer and optionally a reflective layer, optionally intermediate layers and/or optionally a protective layer whereby the information layer contains at least one cobalt-phthalocyanine dye of formula (3);

(3) process for the production of the optical data carrier by coating the cobalt phthalocyanine complex of formula (3), optionally in combination with suitable binders additives and solvents onto a transparent substrate optionally followed by reflective layer, optionally other intermediate layers and optionally a protective layer.

R = alkyl, cycloalkyl, alkenyl, aryl or heteroaryl;

R3-R6 = halogen, cyano, nitro, alkyl, aryl, alkylamino, dialkylamino, alkoxy, alkylthio, aryloxy, arylthio, SO<sub>3</sub>H, SO<sub>2</sub>NR<sub>1</sub>R<sub>2</sub>, CO<sub>2</sub>R<sub>9</sub>, CONR<sub>1</sub>R<sub>2</sub>, NH-COR<sub>7</sub> or -(B)<sub>m</sub>-D;

B = bridging member comprising a direct bond, CH<sub>2</sub>, CO, CH (alkyl), C(alkyl)<sub>2</sub>, NH, S, O or -CH=CH-;

m = 1-10 (1-4);

D = formula (4) or (5) or a metallocenyl or metallocenylcarbonyl having titanium, manganese, iron, ruthenium or osmium metal center;

X1, X2 = NR'R, OR or SR;

Y1 = NR1, O or S;

Y2 = NR1;

n = 1-10;

R',R = H, alkyl, cycloalkyl, aryl or heteroaryl or form a direct bond or a bridge to a C atom of a  $-(CH=CH)_n-$  and/or  $=(CH-CH)_n=$  chain;

w, x, y, z = 0-12;

w+x+y+z = greater than or equal to 12;

R7,R8 = alkylamino, hydroxyalkylamine, dialkylamine, bis hydroxyalkylamine, arylamine or R7 and R8 together with the N atom they are bonded to form a 5-7 membered heterocyclic ring, optionally containing other heteroatoms, preferably O, N or S, whereby NR7R8 is pyrrolidine, piperidine or morpholine;

R12 = alkyl, aryl, heteroaryl or H.

USE - The cobalt phthalocyanine complex of formula (3) is useful as a light absorbing compound for optical data storage (claimed).

ADVANTAGE - The cobalt phthalocyanine dye of formula (3) has good stability to light, satisfactory signal-to-noise ratio, high sensitivity and is applied to the substrate without damage.

#### **EQUIVALENT-ABSTRACTS:**

## ORGANIC CHEMISTRY

Preferred Composition: The information layer also contains a metal free or metal containing phthalocyanine having a central metal of Si, Zn, Al, Cu, Pd, Pt, Au or Ag, (preferably Cu or Pd). The optical data carrier is write-able using light having a wave length of 700-830 nm.

## Preferred Definitions:

L1 and L2 = ammonia, bis(aminopropyl)amine, naphthylamino, methylisonitrile, bis(diethylaminoethyl)isonitrile or naphthylisonitrile;

R3-R6 = chlorine, aminopropylamino, propyloxy or naphthyl;

w, x, y, z = 0-8;

w+x+y+z = greater than or equal to 12;

An- = chloride, formate or CH<sub>3</sub>SO<sub>3</sub>-;

NR7R8 = amino, dimethylamino or naphthylamino;

R12 = hydrogen isobutyl, p-trifluoromethylphenyl or 2-indolyl.

Cobalt phthalocyanine (115 g) in dry chlorobenzene (1L) was mixed with chlorine (16 g) for 0.5 h. Excess chlorine was removed with nitrogen and 3-(methylhydroxyethyl)propylamine (90 g) was added dropwise followed by heating at 90 degrees C for 0.5 h and cooling. The resulting dyestuff was washed (1L chlorobenzene, 1L water) and dried under vacuum to yield 156 g of the dyestuff of formula (6) having a max lambda value of 670 nm (NMP). (6)



**TITLE-TERMS:** NEW COBALT PHTHALOCYANINE COMPOUND USEFUL  
LIGHT ABSORB OPTICAL DATA STORAGE

**DERWENT-CLASS:** A89 E23 G06 L03 P83

**CPI-CODES:** A12-L03C; E23-B; G06-B01; G06-D07; G06-F05; L03-G04B;

**CHEMICAL-CODES:** Chemical Indexing M3 \*13\* Fragmentation  
Code H1 H100 H103 H182 H4 H401 H481 H8  
M210 M211 M273 M281 M312 M313 M321 M332  
M342 M383 M392 M416 M620 M730 Specific  
Compounds RA14Y6 Registry Numbers  
254499

Chemical Indexing M3 \*14\* Fragmentation  
Code A429 A960 C710 D000 E350 M280 M320  
M411 M511 M520 M530 M540 M630 M730 Ring  
Index Numbers 07541 Specific Compounds  
R01160 Registry Numbers 129562 130115

Chemical Indexing M3 \*15\* Fragmentation  
Code C017 C100 C810 M411 M781 Specific  
Compounds R01781 Registry Numbers 270

Chemical Indexing M4 \*01\* Fragmentation  
Code A427 A940 A960 C017 C100 C710 C720  
C801 C803 C804 C805 C806 C807 D000 E350  
H100 H103 H182 H401 H481 M210 M211 M273  
M280 M281 M312 M313 M320 M321 M332 M342  
M383 M392 M411 M424 M510 M511 M520 M530  
M540 M620 M630 M640 M710 M720 M740 N163  
N411 N513 Q344 Q454 W002 W030 W326 W335  
Ring Index Numbers 07541 Specific  
Compounds RA773C Registry Numbers  
547469

Chemical Indexing M4 \*02\* Fragmentation  
Code A427 A940 A960 C017 C100 C710 C720  
C801 C803 C804 C805 C806 C807 D000 E350  
H100 H181 M225 M231 M273 M280 M281 M320

M411 M424 M510 M511 M520 M530 M540 M620  
M630 M640 M710 M720 M740 N163 N411 N513  
Q344 Q454 W002 W030 W326 W335 Ring  
Index Numbers 07541 Specific Compounds  
RA773I Registry Numbers 547475

Chemical Indexing M4 \*03\* Fragmentation  
Code A427 A940 A960 C017 C100 C710 C720  
C801 C803 C804 C805 C806 C807 D000 E350  
F014 F653 H100 H182 H201 M280 M313 M320  
M321 M332 M342 M383 M391 M411 M424 M510  
M511 M520 M521 M530 M540 M630 M640 M710  
M720 M740 N163 N411 N513 Q344 Q454 W002  
W030 W326 W335 Ring Index Numbers 07541  
Specific Compounds RA773M Registry  
Numbers 547479

Chemical Indexing M4 \*04\* Fragmentation  
Code A427 A940 A960 C017 C100 C710 C720  
C801 C803 C804 C805 C806 C807 D000 E350  
H100 H103 H182 M210 M211 M273 M280 M282  
M313 M320 M321 M332 M342 M383 M391 M411  
M424 M510 M511 M520 M530 M540 M620 M630  
M640 M710 M720 M740 N163 N411 N513 Q344  
Q454 W002 W030 W326 W335 Ring Index  
Numbers 07541 Specific Compounds RA773P  
Registry Numbers 547482

Chemical Indexing M4 \*05\* Fragmentation  
Code A427 A940 A960 C017 C100 C710 C720  
C801 C803 C804 C805 C806 C807 D000 E350  
H100 H181 H581 M210 M212 M272 M280 M281  
M313 M320 M321 M332 M342 M383 M391 M411  
M424 M510 M511 M520 M530 M540 M620 M630  
M640 M710 M720 M740 N163 N411 N513 Q344  
Q454 W002 W030 W326 W335 Ring Index  
Numbers 07541 Specific Compounds RA773S  
Registry Numbers 547485

Chemical Indexing M4 \*06\* Fragmentation  
Code A427 A940 A960 C017 C100 C710 C720

C801 C803 C804 C805 C806 C807 D000 E350  
H101 H182 H583 M280 M313 M320 M323 M331  
M342 M383 M393 M411 M424 M510 M511 M520  
M530 M540 M620 M630 M640 M710 M720 M740  
N163 N411 N513 Q344 Q454 W002 W030 W326  
W335 Ring Index Numbers 07541 Specific  
Compounds RA773T Registry Numbers  
547486

Chemical Indexing M4 \*07\* Fragmentation  
Code A427 A940 A960 C017 C100 C710 C720  
C801 C803 C804 C805 C806 C807 D000 E350  
H100 H181 H401 H481 H589 M280 M313 M320  
M323 M331 M342 M383 M393 M411 M424 M510  
M511 M520 M530 M540 M620 M630 M640 M710  
M720 M740 N163 N411 N513 Q344 Q454 W002  
W030 W326 W335 Ring Index Numbers 07541  
Specific Compounds RA773U Registry  
Numbers 547487

Chemical Indexing M4 \*08\* Fragmentation  
Code A427 A940 A960 C017 C100 C710 C720  
C801 C803 C804 C805 C806 C807 D000 E350  
H100 H181 H581 M220 M223 M232 M272 M280  
M281 M313 M320 M321 M332 M342 M383 M391  
M411 M424 M510 M511 M520 M530 M540 M620  
M630 M640 M710 M720 M740 N163 N411 N513  
Q344 Q454 W002 W030 W326 W335 Ring  
Index Numbers 07541 Specific Compounds  
RA773V Registry Numbers 547489

Chemical Indexing M4 \*09\* Fragmentation  
Code A427 A940 A960 C017 C100 C710 C720  
C801 C803 C804 C805 C806 C807 D000 E350  
F000 F521 M280 M320 M411 M424 M510 M511  
M520 M521 M530 M540 M630 M640 M710 M720  
M740 N163 N411 N513 Q344 Q454 W002 W030  
W326 W335 Ring Index Numbers 07541  
Specific Compounds RA773X Registry  
Numbers 547491

Chemical Indexing M4 \*10\* Fragmentation  
Code A427 A940 A960 C017 C100 C710 C720  
C801 C803 C804 C805 C806 C807 D021 D029  
E350 F000 F521 H543 H584 M210 M211 M272  
M283 M312 M323 M332 M342 M383 M393 M411  
M424 M510 M511 M520 M521 M530 M540 M630  
M640 M710 M720 M740 N163 N411 N513 Q344  
Q454 W002 W030 W326 W335 Ring Index  
Numbers 07541 Specific Compounds RA773Y  
Registry Numbers 547492

Chemical Indexing M4 \*11\* Fragmentation  
Code A427 A940 A960 C017 C100 C710 C720  
C801 C803 C804 C805 C806 C807 D021 D029  
E350 F000 F521 H543 M220 M221 M232 M272  
M283 M320 M411 M424 M510 M511 M520 M521  
M530 M540 M630 M640 M710 M720 M740 N163  
N411 N513 Q344 Q454 W002 W030 W326 W335  
Ring Index Numbers 07541 Specific  
Compounds RA7740 Registry Numbers  
547493

Chemical Indexing M4 \*12\* Fragmentation  
Code A427 A940 A960 C000 C017 C100 C101  
C107 C316 C500 C710 C720 C801 C802 C803  
C804 C805 C806 C807 D000 D021 D022 D023  
D024 D025 D029 E350 F000 F019 F020 F021  
F029 G010 G019 G020 G021 G029 G030 G039  
G040 G050 G100 G111 G112 G113 G221 G299  
G553 G563 H100 H101 H102 H103 H121 H141  
H142 H143 H161 H181 H182 H183 H201 H202  
H203 H211 H212 H213 H401 H402 H403 H404  
H405 H481 H482 H483 H484 H498 H541 H542  
H543 H581 H582 H583 H584 H594 H599 H600  
H607 H608 H609 H641 H642 H643 H713 H716  
H721 H722 H723 J011 J012 J013 J014 J131  
J132 J133 J231 J232 J331 J332 J341 J342  
K353 K399 K431 K499 L143 L199 L640 L660  
L699 M112 M114 M119 M121 M122 M123 M124  
M125 M126 M129 M136 M139 M141 M142 M143  
M147 M149 M210 M211 M212 M213 M214 M215

M216 M220 M221 M222 M223 M224 M225 M226  
 M231 M232 M233 M240 M262 M271 M272 M273  
 M280 M281 M282 M283 M311 M312 M313 M314  
 M315 M316 M320 M321 M322 M323 M331 M332  
 M333 M340 M342 M349 M373 M381 M383 M391  
 M392 M393 M411 M424 M510 M511 M520 M521  
 M522 M523 M530 M531 M532 M533 M540 M541  
 M542 M543 M620 M630 M640 M710 M720 M740  
 N163 N411 N513 Q344 Q454 W002 W030 W031  
 W032 W033 W034 W326 W335 W336 Ring  
 Index Numbers 07541 Markush Compounds  
 006384401

**UNLINKED-DERWENT-REGISTRY-  
NUMBERS:**

; 1160U ; 1160S ;  
1781U ; 1781S

**ENHANCED-POLYMER-INDEXING:**

Polymer Index [1.1]  
018 ; P0862 P0839 F41  
F44 D01 D63;

Polymer Index [1.2]  
 018 ; ND01; Q9999  
 Q8924\*R Q8855; B9999  
 B4397 B4240; K9870 K9847  
 K9790; K9847\*R K9790;  
 N9999 N7034\*R N7023;  
 N9999 N7090 N7034 N7023;  
 N9999 N7136 N7034 N7023;  
 B9999 B5414\*R B5403  
 B5276; B9999 B5436 B5414  
 B5403 B5276; K9610  
 K9483; K9483\*R; K9676\*R;  
 K9712 K9676; K9701  
 K9676; N9999 N7329 N7078  
 N7034 N7023;

**SECONDARY-ACC-NO:**

**CPI Secondary Accession Numbers:** 2002-129157